

Modélisation et Commande d'un procédé d'Extrusion Réactive

Samir Eddine Choulak

► To cite this version:

Samir Eddine Choulak. Modélisation et Commande d'un procédé d'Extrusion Réactive. Automatique / Robotique. Université Claude Bernard - Lyon I, 2004. Français. NNT: . tel-00116677

HAL Id: tel-00116677 https://theses.hal.science/tel-00116677

Submitted on 27 Nov 2006

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers. L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés. N° d'ordre : 259-2004

Année 2004

THESE

présentée

à l'Universite Claude Bernard – Lyon 1

pour l'obtention du

DIPLOME DE DOCTORAT

(arrêté du 25 avril 2002)

SPECIALITE AUTOMATIQUE INDUSTRIELLE

Par

Samir Eddine CHOULAK

MODELISATION ET COMMANDE D'UN Procede d'Extrusion Reactive

Directeur de Thèse : M. G. THOMAS

JURY : M. P. CASSAGNAU, M. D. DOCHAIN, Rapporteur M. G-H. HU, Rapporteur M. C. JALLUT, M. M. M'SAAD, Président M. G. THOMAS, Directeur

UNIVERSITE CLAUDE BERNARD - LYON I

Président de l'Université

Vice-Président du Conseil Scientifique Vice-Président du Conseil d'Administration Vice-Présidente du Conseil des Etudes et de la M. le Professeur G. ANNAT Vie Universitaire Secrétaire Général

M. le Professeur D. DEBOUZIE

M. le Professeur J.F. MORNEX M. le Professeur R. GARRONE

M. J.P. BONHOTAL

SECTEUR SANTE

Composantes

UFR de Médecine Lyon R.T.H. Laënnec Directeur : M. le Professeur D. VITAL-DURAND UFR de Médecine Lyon Grange-Blanche Directeur : M. le Professeur X. MARTIN UFR de Médecine Lyon-Nord Directeur : M. le Professeur F. MAUGUIERE UFR de Médecine Lyon-Sud Directeur : M. le Professeur F.N. GILLY UFR d'Odontologie Directeur : M. O. ROBIN Maître de Conférences Institut des Sciences Pharmaceutiques et Directeur : M. le Professeur F. LOCHER **Biologiques** Institut Techniques de Réadaptation Directeur : M. le Professeur L. COLLET Département de Formation et Centre de Directeur : M. le Professeur P. FARGE Recherche en Biologie Humaine Département de Formation à la Recherche et à Directeur : M. le Professeur M. LAVILLE l'Evaluation Pédagogiques

SECTEUR SCIENCES

Composantes

UFR de Physique	Directeur : M. le Professeur J.L. VIALLE
UFR de Biologie	Directeur : M. le Professeur H. PINON
UFR de Mécanique	Directeur : M. le Professeur H. BEN HADID
UFR de Génie Electrique et des Procédés	Directeur : M. le Professeur A. BRIGUET
UFR Sciences de la Terre	Directeur : M. le Professeur P. HANTZPERGUE
UFR de Mathématiques	Directeur : M. le Professeur M. CHAMARIE
UFR d'Informatique	Directeur : M. le Professeur M. EGEA
UFR de Chimie Biochimie	Directeur : M. le Professeur J.P. SCHARFF
UFR STAPS	Directeur : M. le Professeur R. MASSARELLI
Observatoire de Lyon	Directeur : M. le Professeur R. BACON
Institut des Sciences et des Techniques de	Directeur : M. le Professeur J.P. PUAUX
l'Ingénieur de Lyon	
Département de 1 ^{er} cycle Sciences	Directeur : M. J.C. DUPLAN Maître de
	Conférences
IUT A	Directeur : M. le Professeur M. ODIN
IUT B	Directeur : M. le Professeur G. MAREST
Institut de Science Financière et d'Assurances	Directeur : M. le Professeur J.C. AUGROS

« Il n'y a pas de forteresse imprenable, il n'y a que des forteresses mal attaquées. »

Marc NOVELLANI

À mes chers parents ...

Remerciements

Ce travail a été effectué au sein du Laboratoire d'Automatique et du Génie des Procédés (LAGEP) de l'Université Claude Bernard Lyon I, dont le directeur est M. H. FESSI. Qu'il soit remercié pour m'avoir accueilli au sein de son laboratoire ainsi que l'ensemble des membres du LAGEP, Sans oublier M. J. LIETO ancien directeur du laboratoire. Je tiens aussi à remercier M G. THOMAS d'avoir accepté ma candidature, d'avoir été mon directeur de thèse et de m'avoir soutenu tout le long de ma thèse.

Je voudrais exprimer toute ma gratitude à M^{me} F. COUENNE, M. Y. LE GORREC et M. C. JALLUT, qui ont dirigé l'ensemble des travaux effectués dans cette thèse. Qu'ils soient assurés de toute ma reconnaissance pour leur investissement et leurs conseils qu'ils n'ont cessés de prodiguer tout au long de cette étude et pour les rapports amicaux qui se sont instaurés entre nous. Mes remerciements s'adressent également à M B. MASCHKE et M^{me} M. TAYAKOUT, qui, à plusieurs reprises, m'ont apporté leurs soutien et encouragements.

Je tiens à remercier M. A. MICHEL pour son accueil au sein du laboratoire des matériaux plastiques et biomatériaux (LMPB). Je remercie également M. P. CASSAGNAU pour son aide précieuse, pour les travaux expérimentaux de cette étude et pour les conseils qu'il m'a apportés durant cette thèse. Mes remerciements s'adressent également à M. F. MELIS pour sa disponibilité et ses précieux conseils.

Je suis très sensible à l'honneur que me font M. D. DOCHAIN, M. G. H. HU en acceptant d'être rapporteurs de mon travail et M. M. M'SAAD pour avoir été membre de mon jury. Q'ils trouvent ici toute ma gratitude pour leur participation au jury de cette thèse.

Je ne saurais oublier ceux qui ont rendu ces quatre années agréables : Ahmed (le gentil), Alex (le petit chat), Audrey (la gentille), Elodie (l'ange), Eric (le baratineur), Mathieu (le président), Moussa (le bogosse), Damien genou (le dormeur), Damien cheville (le VTTiste), Thibeau (le motard), Manu (le timide), David (le serein), David (le bricoleur), Toufik (la classe), Christelle (la souriante), Fabiola (la bavarde), Carole (la rolleuse), Bérengère (la style), Claudia(la clodo), Gérard (le grand), Patrice (le pharmacien), Miguel (le mexicain), Laurent (le voyageur), Hamid (le penseur), Pierre (le sympa), Aurélie (la bosseuse), Raphaël (le touriste), Charlotte (la douce), Sandra (la dynamique), Héléna (la suédoise), Olivier (l'informaticien), Delphine (l'élégance) et Benaouda (le manga), merci à vous tous et à toutes les personnes qui ont contribué à rendre mon séjour au LAGEP extrêmement agréable.

Je remercie vivement mes cousins M. et M^{me} TARCHOUN pour l'accueil qu'ils m'ont réservé depuis mon arrivée en France. Mes remerciements vont également à mes amis d'enfance Yacine et Samy pour leur amitié qui dure depuis plus de 20 ans, pour leur soutien dans les moments difficiles et pour leurs encouragements. Aussi, j'adresse mes remerciements à mon amie Nassima pour son soutien durant la dernière phase de ma thèse.

Je terminerai enfin par une pensée particulière pour mes parents, à qui je dois – entre autres !- d'avoir pu suivre mes études, et pour mes sœurs et frère, qui malgré la distance, m'ont accompagné moralement tout au long de ce parcours. Mes pensées s'adressent également à ma grand-mère, mes tantes (particulièrement ma tante Salima), mes oncles Zoubir et Mouloud et à l'ensemble de ma famille.

Sommaire

INTRODUCTION GENERALE	13
CHAPITRE 1 : BIBLIOGRAPHIE	19
1.1. Introduction :	21
1.2. DESCRIPTION ET CLASSIFICATION DES EXTRUDEUSES :	21
1.2.1 Description générale :	23
1.2.2 Classification des extrudeuses bivis	24
1.2.3 Principaux éléments des extrudeuses bivis	25
1.3. MODELISATION DES EXTRUDEUSES BIVIS	35
1.3.1 Introduction	35
1.3.2 Etude biliographique :	37
1.4. CONCLUSION :	71
CHAPITRE 2 : MODELISATION DU PROCEDE D'EXTRUSION REACTIVE	73
2.1. INTRODUCTION :	75
2.2. Strategie adoptee :	75
2.3. ASPECT ECOULEMENT DU MODELE :	77
2.3.1 Expression des débits pour les éléments de vis à pas direct et inverse	78
2.3.2 Les malaxeurs :	83
2.3.3 La filière	85
2.3.4 Calcul du profil de pression :	86
2.4. ASPECT REACTIF DU MODELE	89
2.4.1 Introduction	89
2.4.2 Mécanisme réactionnel de la réaction chimique	89
2.4.3 Vitesse de la réaction : étude cinétique en réacteur fermé parfaitement agité isotherme	91

2.4.4 Rhéologie du milieu réactif :	95
2.4.5 Bilans matière :	99
2.5. ASPECT THERMIQUE DU MODELE	103
2.5.1 Introduction	103
2.5.2 Calcul des dissipations visqueuses :	103
2.5.3 Coefficient d'échange de chaleur	108
2.5.4 Enthalpie de réaction :	110
2.5.5 Bilan d'énergie :	111
2.6. construction d'un modele pour un procede d'extrusion reactive donne .	115
2.6.1 Modèle d'écoulement	115
2.6.2 Prise en compte des échanges thermiques :	124
2.6.3 Modélisation de la réaction :	127
2.7. CONCLUSION :	130
CHAPITRE 3 : ANALYSE ET VALIDATION DU MODELE DE SIMULATION.	133
3.1. INTRODUCTION :	135
3.2. DETERMINATION DU NOMBRE DE REACTEUR :	135
3.2.1 Etude expérimentale :	135
3.2.2 Etude du modèle RCPA :	139
3.2.3 Validation qualitative et expérimentale du modèle d'écoulement théorique	147
3.3. SIMULATION DYNAMIQUE ET STATIQUE DU PROCEDE D'EXTRUSION REACTIVE :	163
3.3.1 Simulations en régime stationnaire :	164
3.3.2 Simulations en régime dynamique :	170
3.3.3 Validation quantitative du modèle global :	183
3.4. CONCLUSION :	189
CHAPITRE 4 : DU MODELE DE SIMULATION AU MODELE DE COMMAND ANALYSES ET SIMPLIFICATIONS	E – 191

4.1. INTRODUCTION	193
4.2. ANALYSE DU MODELE POUR LA COMMANDE	195
4.2.1 Simulation	195
4.3. ELABORATION DU MODELE LINEAIRE	209
4.3.1 Modèle linéarisé tangent	210
4.3.2 Simulation	210
4.4. COMMANDABILITE ET OBSERVABILITE	221
4.4.1 Commandabilité	221
4.4.2 Observabilité	222
4.5. Analyse modale	223
4.5.1 A propos de structure propre	223
4.5.2 Concept de la simulation modale	228
4.5.3 Simulation modale du modèle linéarisé	230
4.5.4 Réduction de modèle par simulation modale	234
4.6. Conclusion	238
CHAPITRE 5 : COMMANDE DU PROCEDE D'EXTRUSION REACTIVE	241
5.1. INTRODUCTION	243
5.2. Etude bibliographique	243
5.3. Synthese de la loi de commande	255
5.3.1 Analyse des principaux transferts d'un asservissement :	256
5.3.2 Notions élémentaires de robustesse	258
5.3.3 La synthèse H_{∞}	267
5.4. Application de la commande H_{∞} sur le procede d'extrusion	
5.5. Conclusion :	298
CONCLUSION ET PERSPECTIVES	301

REFERENCES BIBLIOGRAPHIQUES	
NOMENCLATURE	
ANNEXES	

INTRODUCTION GENERALE

Introduction générale

Dans l'industrie chimique, l'extrusion est un procédé de mise en forme de matériaux mais aussi de fabrication en continu de produits finis ou semi-finis (films, plaques, tubes, isolation de câbles...), au sein d'un système vis/fourreau appelé *extrudeuse*. Le terme « *extrusion* » caractérise les procédés consistant à forcer un produit à s'écouler à travers un orifice de petite dimension, la *filière*. La matière est alors convoyée sous l'action de pressions importantes obtenues grâce à une ou plusieurs *vis* d'Archimède. Ces vis tournent dans l'alésage d'une enveloppe fixe appelée *fourreau*.

On distingue principalement deux types d'extrudeuses, les extrudeuses monovis et bivis. Le fonctionnement de ces deux types d'extrudeuses est sensiblement différent. D'un point de vue fonctionnel, la différence principale réside dans le mécanisme de transport. Par ailleurs, le côté modulable des extrudeuses bivis, qui permet d'obtenir différents temps de séjour ou degrés de mélange le long de la machine, offre une plus large flexibilité d'utilisation. Cela a ouvert la voie à d'autres applications utilisant l'extrudeuse bivis en tant que réacteur chimique continu. De là, le principe de l'extrusion réactive est né mettant en commun deux disciplines bien distinctes : la chimie et le procédé d'extrusion classique. Cet aspect chimie-extrusion a poussé la communauté scientifique à lancer plusieurs projets de recherche dans le but d'approfondir la connaissance, la compréhension et le fonctionnement de ce type de procédé. Ces recherches ont permis dans certains cas d'optimiser les procédés d'extrusion réactive et d'élaborer de nouveaux produits ayant des caractéristiques plus attrayantes, avec un gain de temps immédiat, comparativement aux réacteurs discontinus.

Les mécanismes impliqués en extrusion réactive sont nombreux et peuvent être regroupés en trois catégories principales (Michaeli et al, 1995)

- Ecoulement (temps de séjour, mélange, rhéologie de la matière fondue),
- Thermique (convection, dissipation visqueuse),
- Réaction (cinétique, chaleur de réaction, équilibre).

De fortes interactions existent entre les différents mécanismes rendant la compréhension et la modélisation du procédé d'extrusion réactive très complexe. Ainsi, la maîtrise des propriétés finales du produit en sortie de filière passe d'abord par une maîtrise du

procédé d'où la nécessité d'élaborer un modèle si l'on veut mieux comprendre son fonctionnement.

OBJECTIF DE LA THESE

L'objectif final de ce travail est de synthétiser une loi de commande permettant de contrôler la qualité du polymère en sortie de filière via le contrôle de la viscosité. Pour atteindre cet objectif, il est nécessaire d'obtenir un modèle dynamique global du procédé d'extrusion permettant de prédire le comportement du système vis-à-vis des conditions opératoires. Une démarche mixte alliant l'aspect mécanique des milieux continus à celui du génie des procédés a été adoptée pour l'élaboration du modèle dynamique prédictif. Le schéma d'écoulement intrinsèquement à paramètres distribués, est approché par une cascade de réacteurs parfaitement agités (RCPA) avec reflux. Les caractéristiques de l'écoulement sont issues de la mécanique des fluides. Le modèle global est alors obtenu en écrivant les bilans d'énergies sur la matière, les fourreaux et les vis puis les bilans de masse globaux et par espèce sur chaque RCPA de la cascade. La démarche a été par la suite illustrée sur la réaction de polymérisation de l'ɛ-caprolactone. Le choix s'est porté sur cette réaction car toutes les données rhéocinétiques, nécessaires à la modélisation, sont disponibles dans les travaux de Gimenez (1999).

Ce travail se situe dans le cadre du programme national CNRS intitulé : « Procédé d'extrusion réactive pour l'élaboration de matériaux polymères à propriétés d'usage spécifiques ». Ce CPR a permis de mettre en place une collaboration entre notre laboratoire le LAGEP (*laboratoire d'automatique et du génie des procédés*) et le laboratoire LMPB (*Laboratoire des Matériaux Plastiques et Biomatériaux*) dont nous bénificions de l'expérience et du matériel dans le domaine de l'extrusion.

ORGANISATION DU MEMOIRE

Le chapitre 1 de ce manuscrit présente, dans un premier temps, les généralités sur l'extrusion bivis. Il définit les caractéristiques géométriques et les fonctions des différents éléments constituant une extrudeuse : les fourreaux, le profil de vis,...etc. Dans un second temps, est présentée une synthèse bibliographique concernant les travaux réalisés dans le domaine de la modélisation des procédés d'extrusion que ce soit dans le domaine des matériaux plastiques ou le domaine agroalimentaire. Différentes approches de modélisation sont présentées en focalisant la recherche bibliographique sur les modèles de compréhension monodimensionnels capable de prédire le comportement du procédé en régime dynamique (transitoire).

Dans le chapitre 2 nous proposons un modèle dynamique original pour le procédé d'extrusion réactive en machine bivis. Nous exposons l'approche adoptée et les étapes de modélisation suivies. Les différents sous-modèles constituant le modèle dynamique global (écoulement, thermique, réaction et rhéologie) sont décrits en détaillant les points de calcul importants dans chaque sous-modèle (calcul du profil de pression, calcul de la viscosité, calcul des dissipations visqueuses,...). Enfin, un exemple montrant les différentes phases de la construction d'un modèle du procédé d'extrusion réactive est présenté afin d'illustrer et de résumer la démarche que nous aurons adoptée.

Le chapitre 3 illustre les résultats de simulation et leur analyse pour la validation du modèle. Ces simulations ont été réalisées à la fois en régime statique et dynamique. Une première étape de validation est réalisée sur le modèle d'écoulement en se basant sur l'étude des distributions du temps de séjour (DTS) expérimentales. La seconde étape concerne la validation qualitative et expérimentale du modèle global en étudiant l'évolution des paramètres du procédé en simulation vis-à-vis des variations appliquées en entrée du système. La validation expérimentale du modèle a porté sur le comportement de la pression en filière face à la variation de la vitesse des vis et du rapport Monomère/Amorceur ($[M_0]/[I_0]$).

Le chapitre 4 est consacré à l'étude et l'analyse du modèle global pour la commande. Le but est de simplifier les phénomènes les moins influents sur l'évolution des variables d'état du procédé (température, pression, viscosité,...). Cette étape d'analyse est suivie par une linéarisation du modèle global réduit afin d'obtenir un modèle linéaire simple utilisable pour la synthèse d'une loi de commande. Le modèle linéaire ainsi obtenu est validé autour du point de fonctionnement. Enfin, le concept de la simulation modale est présenté. Ce dernier est exploité pour entreprendre une réduction de modèle. Le modèle linéaire réduit a ensuite été comparé au modèle linéaire complet afin de valider son comportement dans une plage de fonctionnement autour du point d'équilibre. Pour terminer ce travail, nous avons présenté dans le dernier chapitre (Chapitre 5) une étude bibliographique portant sur la commande des procédés d'extrusion. Cette étude a été suivie par une présentation des différents concepts se rattachant à la synthèse H_{∞} . Cette technique de contrôle a été choisie pour commander la qualité du polymère en sortie de filière en agissant sur le débit d'alimentation, la vitesse des vis, le rapport $[M_0]/[I_0]$ et la puissance de chauffe des fourreaux. La loi de commande élaborée a été par la suite appliquée à la fois sur le modèle linéaire réduit, le modèle linéaire complet et le modèle non linéaire autour du point de fonctionnement. Les différents résultats de simulations obtenus ont été analysés et commentés.

Enfin, nous terminons la présentation de ces travaux par une conclusion générale et les perspectives qu'offre cette étude.

CHAPITRE 1 : BIBLIOGRAPHIE

1.1. INTRODUCTION :

Les méthodes d'extrusion résultent d'un transfert de technologie entre l'industrie des matériaux plastiques et l'industrie agroalimentaire. Le premier extrudeur monovis (1873), conçu pour la fabrication de câbles en continu fût adopté dans l'agroalimentaire vers 1930. L'extrusion bivis, conçue en 1869 pour extruder des produits alimentaires, fit son apparition dans le domaine des matériaux plastiques vers 1940. Depuis, l'extrusion monovis comme l'extrusion bivis ont connu des développements parallèles aussi bien dans l'industrie des polymères qu'en agroalimentaire.

Le principe technologique de l'extrusion bivis s'est affirmé avec le développement des matériaux plastiques et de synthèse. Elles sont désormais de plus en plus employées en tant que réacteurs chimiques, comme procédé de synthèse ou de modification des polymères. Les délais de mise au point d'une réaction sur ce type de machine sont souvent bien inférieurs à ceux nécessaires en réacteur de type fermé (batch). De même, pour l'industrie alimentaire, l'extrusion bivis est devenue un mode de production privilégié où les applications pour l'alimentation se multiplient (pain plat, snacks, céréales pour le petit déjeuner,...). Cet intérêt grandissant s'explique par la souplesse d'utilisation et la très grande variété d'applications qu'offre un tel procédé.

Dans ce chapitre, nous allons, dans un premier temps, décrire le procédé d'extrusion ainsi que les principales caractéristiques géométriques qui s'y attachent. Dans un second temps, nous présentons une synthèse bibliographique des principaux travaux concernant la modélisation monodimensionnelle des procédés d'extrusion bivis. Différents types de modèle seront présentés (modèles statiques, modèles dynamiques, modèles type «boîte-noire»).

1.2. DESCRIPTION ET CLASSIFICATION DES EXTRUDEUSES :

Comme nous l'avons souligné dans l'introduction générale, il existe principalement deux classes d'extrudeuse : les extrudeuses monovis et les extrudeuses bivis. Un type d'extrudeuse est défini par son nombre de vis, leur sens de rotation et leur position relative dans le cas d'une extrudeuse bivis. Le fonctionnement des extrudeuses bivis est sensiblement différent de celui des monovis. Dans les extrudeuses monovis, l'effet d'extrusion est nul si la matière adhère à la vis. L'avancée de la matière n'est possible que si le coefficient de frottement sur le fourreau est élevé. L'extrusion de liquides collants, peu visqueux ou dont l'évolution du coefficient de frottement avec la température est défavorable, est difficile et parfois impossible. Le but premier de la technologie bivis a été de remédier à ces problèmes. La présence de la deuxième vis permet de forcer la matière à avancer dans la machine, quelle que soit la configuration des vis et le profil des filets. L'action de propulsion est beaucoup moins dépendante de la température, du matériau et de la pression en tête de filière. Par contre, elle dépend fortement des caractéristiques géométriques de la machine (interpénétration des filets de vis, sens de rotation des vis, conjugaison des filets,...).

Par ailleurs, l'utilisation de l'extrudeuse bivis (corotative ou contrarotative) en tant que réacteur continu dans le domaine des matériaux plastiques présentes de nombreux avantages par rapport aux réacteurs chimiques de type fermé (batch). Le Tableau 1-1 contient la liste des principaux avantages et inconvénients des extrudeuses bivis par rapport aux réacteurs chimiques classiques.

Avantages du procédé d'extrusion bivis	Limites du procédé d'extrusion bivis
Capacité d'homogénéisation et de mélange importante	• Réactions secondaires parasites si la
(même pour les polymères de viscosité importante).	température est trop élevée.
• Transfert thermique efficace du fourreau vers le	• Diffusion des réactifs à l'état fondu nettement
polymère et au sein même du polymère à cause du	moins élevée que dans un solvant.
transfert du matériau d'une vis à l'autre.	• Réactifs corrosifs interdits (endommagement
• Utilisation de solvant inutile dans le cas de réaction de	des vis).
polymérisation (avantage économique et écologique).	• Temps de séjour limité (ce qui implique la mise
• Nombreuses possibilités d'injection des réactifs le	en œuvre de réactions chimiques à cinétique
long de l'extrudeuse.	« rapide »).
• Ajustement possible des éléments de vis en fonction	
du temps de séjour désiré.	
• Supporte des pressions élevées (de 0 à 500 bars) et des	
températures importantes (jusqu'à 400-500°C).	
 Procédé continu (produit fini en sortie de filière). 	
• Possibilité d'extraction des produits de la réaction et	
des composants n'ayant pas réagi par dégazage.	

Tableau 1-1 : Avantages et limites de l'extrusion bivis

1.2.1 Description Generale :



La Figure 1-1 illustre une vue générale d'une extrudeuse bivis industrielle.

Figure 1-1 : Vue générale d'une extrudeuse bivis (CLEXTRAL) (Vergnes et Chapet, 2000)

En général, une extrudeuse bivis se compose des éléments suivants :

- un groupe d'entraînement (ensemble de réducteur, du diviseur de couple et de limiteur) ainsi que le moteur principal ;
- un ou plusieurs dispositifs d'alimentation en matière (trémie et doseur) ;
- un ensemble vis-fourreau avec ses accessoires de chauffage et de refroidissement ;
- une filière pour la mise en forme du produit et éventuellement un dispositif de découpe du produit en sortie de filière.
- Enfin, pour la conduite de l'extrudeuse, une armoire de pilotage qui réunit les organes de démarrage et de sécurité, les dispositifs de régulation, de commande, d'affichage et de mesure.

Le profil de vis, le nombre de fourreaux et la filière sont des paramètres importants pour caractériser et dimensionner une extrudeuse. Hormis ces paramètres, le contrôle d'un procédé d'extrusion est aussi assuré par des conditions propres à chaque procédé. Il s'agit des paramètres « machine » et « produit».

Les paramètres « machine » sont les paramètres qui dépendent uniquement de la machine, on peut citer :

- le débit d'alimentation de la matière (F_0) ,
- la vitesse de rotation des vis (*N*)
- la température de consigne des fourreaux (T_f) .

D'un autre côté, les paramètres « produits » sont ceux qui caractérisent le produit à extruder, on a :

- la composition du produit ;
- les caractéristiques thermo-physiques et rhéologiques du produit.

1.2.2 <u>CLASSIFICATION DES EXTRUDEUSES BIVIS</u>

Comme son nom l'indique, une extrudeuse bivis comprend deux vis le plus souvent parallèles, tournant à l'intérieur d'un fourreau dont la section à la forme d'un huit. Cependant, selon le sens de rotation et suivant la géométrie des vis ainsi que leur position relative, on peut distinguer différentes classes d'extrudeuses répertoriées selon divers critères. Les trois principaux critères sont (Figure 1-2) :

- Le sens de rotation : lorsque les deux vis ont le même sens de rotation, l'extrudeuse est dite corotative (*Co-rotating*). Dans le cas contraire, c'est à dire lorsqu'elles tournent en sens inverse l'une par rapport à l'autre, elle est dite contrarotative (*Counter-rotating*).
- L'interpénétration : le degré de pénétration des filets d'une vis dans le chenal de la vis adjacente définit l'interpénétration des filets (*Intermeshing*). Cette interpénétration pourra être partielle ou totale. Dans les autres cas, on aura affaire à des vis tangentes ou non-interpénétrées.

• *La conjugaison* : si le filet d'une vis épouse parfaitement la forme des filets de l'autre vis, les vis sont dites à filets conjugués (*Conjugated*). Dans ce cas, les écoulements de matière entre les deux vis sont très limités, les vis sont dites aussi autonettoyantes.



Figure 1-2 : Classification des systèmes bivis (Vergnes et Chapet, 2000)

Il existe d'autres critères de différentiation qui caractérisent les extrudeuses bivis, mais ils jouent un rôle moins important que les trois précédents sur les conditions d'écoulement. Néanmoins, la combinaison des différents critères est possible et le choix d'une configuration va dépendre essentiellement de l'application recherchée.

Dans le domaine de l'extrusion réactive, les extrudeuses bivis corotatives sont de loin les extrudeuses les plus utilisées grâce à leur grande capacité de mélange qui est largement supérieure à celle des extrudeuses classiques (monovis ou bivis contrarotatives). En effet, la rotation des vis dans la même direction permet à la matière d'être transférée d'une vis à l'autre et subit un malaxage continu.

1.2.3 <u>PRINCIPAUX ELEMENTS DES EXTRUDEUSES BIVIS</u> 1.2.3.1 Le fourreau :

Le fourreau représente l'enveloppe extérieure fixe dans laquelle tournent les vis. L'ensemble vis-fourreau constitue la partie active et assure le traitement de la matière. La matière est introduite dans l'extrudeuse par un orifice d'alimentation principal grâce à des dispositifs doseurs pour les solides ou à des pompes pour les liquides. La matière est alors transformée dans la zone de passage entre les vis et la surface interne du fourreau. Cet espace libre est appelé circuit bivis. La rotation des vis fait progresser la matière jusqu'à son extrémité et la fait sortir à travers une filière.

Dans les équipements modernes, l'ensemble vis-fourreau est conçu de façon modulaire. Cet aspect modulaire permet une grande flexibilité d'utilisation. De ce fait, le fourreau peut être composé de modules correspondant chacun à une fonction particulière (alimentation, dégazage,...). Le nombre de modules composant le fourreau peut varier de 3 à 12 suivant le procédé. La forme géométrique du fourreau peut être soit rectangulaire soit cylindrique comme le montre la Figure 1-3.



Figure 1-3: Différentes géométries de fourreau

Dans les différents procédés d'extrusions, que ce soit dans le domaine agroalimentaire ou celui des matières plastiques, la température est considérée comme étant un paramètre important dont il est nécessaire de bien la contrôler. En conséquence, l'ensemble des fourreaux constituant le corps de l'extrudeuse est régulé en température par un système combiné de chauffage externe (résistif ou inductif), piloté par des sondes de contrôle de température, avec un système de refroidissement interne (souvent sommaire et non utilisable pour une commande), la plupart du temps à circulation d'eau (Figure 1-4).



Figure 1-4 : Régulation thermique des fourreaux (Vergnes et Chapet, 2000)

1.2.3.2 La filière

Une filière d'extrusion est un outillage qui permet de donner forme au produit extrudé. Elle se situe en fin de l'extrudeuse et le rôle principal qu'elle doit jouer est de fournir à la sortie de l'outillage un produit aux dimensions requises, uniforme en température. Ainsi, la forme du produit désirée en sortie de filière va dépendre de la conception géométrique de l'outillage.

Dans le domaine des matières plastiques, le polymère qui a été fondu et mis en pression dans l'extrudeuse va ensuite s'écouler à travers une filière afin de lui donner sa forme. Cette fabrication en continu de semi-produits ou de produits finis de section constante (plaques, feuilles, tubes...) par extrusion à travers une filière est de loin le procédé de transformation le plus répondu.

1.2.3.3 Les vis :

De la même manière que les fourreaux, les vis sont modulaires. Ceci permet de composer différentes configurations géométriques selon l'application désirée. En effet, les deux vis de l'extrudeuse sont constituées de tronçons empilés sur deux arbres cannelés (Figure 1-5). Il existe trois types de vis :

- les éléments à pas direct (ou pas positif), appelés filets ;
- les éléments à pas inverse (ou négatif), appelés parfois « contre-filets» ;

• les blocs malaxeurs.



Figure 1-5: Tronçons vis et arbres cannelés (Vergnes et Chapet, 2000)

Le profil de vis de chaque zone de l'extrudeuse (zone d'alimentation, zone de transport, zone de compression-fusion,...) est choisi selon les fonctions recherchées. Dans la zone d'alimentation, l'utilisation d'éléments de vis à grands pas permet de favoriser l'avalement de la matière avec un fonctionnement de la vis partiellement remplie qui évite les refoulements à l'alimentation. En configuration bivis, c'est la rotation des deux vis qui, en constituant une pompe volumétrique, va pousser les granulés du polymère solide (domaine des matériaux plastiques) vers l'aval, quelles que soient les conditions de frottement sur les parois, le débit et la vitesse de rotation de vis sont par conséquent deux paramètres indépendants. La matière solide contenue dans les vis reste dans la zone d'interpénétration ou bien tombe par gravité dans la partie basse du chenal ; là elle est poussée par les filets arrières et se déplace dans la direction axiale avec une vitesse égale à la vitesse d'avancée des filets de vis, soit *NB*, avec *N* la vitesse de rotation des vis et *B*, le pas de l'élément (Agassant et al., 1996).

La section suivante égalise le débit et compacte la matière, le pas diminue progressivement et le remplissage augmente. Dans la zone de compression-fusion, le pas est faible et favorise un remplissage maximum. Il y a alors génération de forts cisaillements et les transferts de chaleur avec le fourreau sont favorisés. La présence d'éléments de vis tels que les contre-filets ou les malaxeurs permettent d'accélérer le processus de fusion (Figure 1-6).

Le processus de fusion est très rapide, se produit sur une courte distance et est totalement différent de celui observé en machine monovis. Vergne et al. (1999) montrent que quatre étapes sont généralement observées et que la fusion est dépendante de la géométrie des vis. Elle est aussi plus efficace à haute vitesse de rotation et à faible débit et est influencée par la taille relative des granulés et du chenal des vis. Récemment, à partir des travaux préliminaires de Noé (1992), complétés par Vergnes et al. (1999), une approche du processus de fusion a été développée, basée sur l'écoulement d'un mélange solide/liquide possédant une viscosité équivalente (Vergnes et al., 2001)

Enfin, on trouve la zone d'écoulement à l'état fondu où l'on note la présence de zones totalement remplies (c'est-à-dire sous pression) et de zones partiellement remplies (c'est-à-dire à la pression atmosphérique). En effet, du fait de la présence d'éléments restrictifs (éléments de vis à pas inverse, blocs malaxeurs et filière), on observe une alternance de zones sous pression et à l'air libre.



Figure 1-6 : Phénomène de fusion en extrudeuse bivis (Agassant et al., 1996)

1.2.3.3.1 Les malaxeurs :

Les malaxeurs sont dépourvus d'hélicité et ont une section transversale identique à celle des éléments de vis. Ils sont définis par le nombre de disque (n_d) , l'épaisseur des disques (E) et l'angle entre deux disques successifs (α_d) (Figure 1-7). Comme pour les éléments de vis à pas direct ou inverse, les malaxeurs sont montés sur les arbres en étant décalés d'un certain angle les uns par rapport aux autres. Ce décalage provoque pendant leur rotation des écoulements complexes, aptes à un mélange efficace. Ce décalage est dit direct (ou droit) si les sommets créent un pseudo-chenal analogue à celui d'un élément de vis à pas direct. Dans le cas contraire, on parlera de décalage inverse (ou gauche). Dans cette configuration, les

malaxeurs s'opposent à l'écoulement naturel de la matière vers l'aval de la machine et constituent, comme les éléments de vis à pas inverse, des éléments dits restrictifs.



Figure 1-7 : Blocs malaxeurs d'éléments malaxeurs bilobes et trilobes (Vergnes et Chapet, 2000)

1.2.3.3.2 Analyse géométrique des vis :

La géométrie des vis d'une extrudeuse bivis corotative a été étudiée très en détail par Booy (1978). Les formulations de bases émises par Booy sur l'analyse géométrique des vis restent une référence pour de nombreuses études. L'auteur considère qu'il n'y a aucun jeu entre les vis, ni entre les vis et le fourreau. La section des vis, dans un plan perpendiculaire aux axes, est obtenue en supposant que le contact entre les vis reste permanent pendant qu'elle glisse l'une sur l'autre.

Trois paramètres suffisent alors pour décrire la géométrie des vis :

- \blacktriangleright Le rayon de la vis R_{ext}
- \succ L'entraxe, C_l
- \succ Le nombre de filets, *n*

La Figure 1-8 récapitule les principales dimensions géométriques qui caractérisent une vis (le pas de vis B, la largeur du chenal W, l'épaisseur du filet e,...).



Figure 1-8: Géométrie de la vis et dimensions caractéristiques (Vergnes et Chapet, 2000)

La largeur du chenal, étant fonction du nombre de filets, elle est donnée par (Figure 1-8) :

$$W = \frac{B\cos\phi}{n} - e \qquad \qquad \text{Eq. 1-1}$$

 ϕ étant l'angle que fait le filet avec un plan perpendiculaire à l'axe des vis. Il est défini à partir du pas *B* par (Figure 1-8):

$$tg \phi = \frac{B}{2\pi r}$$
 où r est la position radiale Eq. 1-2

Pour des vis peu profondes, on a :

$$tg\,\phi = \frac{B}{2\,\pi\,R_{ext}}$$
 Eq. 1-3

L'épaisseur du filet e, prise au niveau du diamètre extérieur, dans un plan perpendiculaire au chenal de la vis, est égale à (Figure 1-8) :

$$e = \alpha R_{ext} \sin \phi$$
 Eq. 1-4

 ψ est l'angle de la zone d'interpénétration des filets. Il peut être calculé à partir de la relation suivante (Figure 1-8):

$$\cos(\psi) = \frac{C_l}{2R_{ext}}$$
 Eq. 1-5

D'autre part, la profondeur du chenal (*h*) le long d'une section droite peut être calculée à partir de l'analyse de Booy (1978). Elle est constante et maximale entre les points B et C (Figure 1-9). Elle est donnée par :

$$H=2R_{ext}-C_l$$
 Eq. 1-6

Cette profondeur est nulle, entre les points D et E (compte tenu de l'hypothèse qu'il n'y a aucun jeu). Entre les points B et A, pour un angle variant entre 0 et 2γ , elle vaut :

$$h(\gamma) = R_{ext} \cdot (1 + \cos(\gamma)) - \sqrt{C_l^2 - R_{ext}^2 \sin^2 \gamma}$$
 Eq. 1-7



Figure 1-9 : Evolution de la profondeur du chenal dans les sections transversales (a) et axiales (b) (d'après Booy, 1978)

En pratique, le nombre de filets varie entre un et trois, les éléments de vis à deux filets étant les plus utilisés pour l'extrusion des polymères. La forme de la section, dans un plan perpendiculaire à l'axe des vis, est directement fonction du nombre de filets (Figure 1-10) :



Figure 1-10 : Section transversale de vis à un, deux et trois filets (d'après Booy, 1978)

Si α est l'angle définissant l'épaisseur du filet sur les coupes transversales de la vis, alors pour une vis à *n* filets, on a (Figure 1-11):

$$n(2\alpha + 4\psi) = 2\pi \qquad \qquad \text{Eq. 1-8}$$

Soit :

$$\alpha = \frac{\pi}{n} - 2\psi \qquad \qquad \text{Eq. 1-9}$$



Figure 1-11 : Section perpendiculaire à l'axe des vis d'une vis à deux filets (d'après Booy, 1978)

La section dans un plan perpendiculaire à l'axe des vis et la représentation déroulée de la géométrie des vis font apparaître l'existence de trois chenaux indépendants imbriqués



(Figure 1-12). En conséquence, on peut considérer que les conditions d'écoulement le long de ces chenaux comme identiques.

Figure 1-12: Géométrie de vis à deux filets (coupe transversale et vue de dessus) (Agassant et al., 1996)

Théoriquement, le nombre de chenaux indépendants est donné par :

Lorsque α est petit, on peut donc considérer 2*n*-1 chenaux indépendants.

A partir d'une analyse géométrique parfois complexe, on peut ensuite établir les principaux paramètres du système. Par exemple, la section transversale libre du fourreau s'écrit :

$$S_F = 2(\pi - \psi)R_{ext}^2 + C_l \cdot R_{ext} \cdot \sin\psi \qquad \text{Eq. 1-11}$$

De même, l'aire d'une section transversale d'une vis est définie par :

$$S_{V} = n \left[\psi \cdot C_{l}^{2} - C_{l} \cdot R_{ext} \cdot sin\psi \right] + \frac{n\alpha}{2} \left[R_{ext}^{2} + \left(C_{l} - R_{ext} \right)^{2} \right]$$
Eq. 1-12

Ainsi, la section libre occupée par la matière est donnée par :

$$S_L = S_F - 2S_V \qquad \qquad \text{Eq. 1-13}$$

1.2.3.4 Les différents types d'écoulements :

De la classification des extrudeuses bivis présentée ci-dessus résultent des propriétés géométriques des chenaux de vis et donc des types caractéristiques d'écoulements. D'après la ci dessous (Figure 1-13), on remarque que pour des vis contrarotatives le passage de la matière d'une vis sur l'autre dans la zone d'interpénétration est très limité. La matière occupe sur chacune des vis un espace en forme de «C». On observe alors des écoulements dits de «*Chambre en C*» (Janssen, 1978). Dans ce type d'écoulement, il y a très peu d'échanges avec les chambres voisines.

D'autre part, pour les géométries présentant une importante ouverture en zone d'interpénétration, on observe un écoulement de type « chenal continu ». Dans ce type d'écoulement la matière passe très facilement d'une vis à l'autre, en suivant une trajectoire hélicoïdale en forme de huit. Enfin, entre ces deux cas extrêmes, on peut imaginer tous les cas intermédiaires possibles, avec une zone d'interpénétration qui permet le passage d'une vis sur l'autre, tout en le restreignant de manière sensible.



Figure 1-13 : Zone d'interpénétration dans les systèmes bivis (Vergnes et Chapet, 2000)

1.3. <u>MODELISATION DES EXTRUDEUSES BIVIS</u> 1.3.1 <u>INTRODUCTION</u>

La complexité du procédé d'extrusion réactive rend difficile sa compréhension et son optimisation. Son contrôle dépend de nombreuses variables qui sont souvent interdépendantes. La plus grande difficulté lors de la modélisation réside dans le fait que
chaque mécanisme interagit avec les autres et de fortes et nombreuses interactions existent entre l'évolution de la réaction, l'écoulement de la matière et les transferts thermiques (Figure 1-14).



Figure 1-14 : Schéma général des interactions lors d'une opération d'extrusion réactive (Michaeli et al., 1995)

Ces interactions vont déterminer les propriétés finales du produit extrudé. On peut constater par exemple que toute élévation de température se répercute immédiatement sur la cinétique des réactions chimiques et sur la valeur du taux de conversion. Cette élévation de température peut parfois conduire à une dégradation de l'un des constituants du mélange réactif, à des réactions d'oxydation ou à un déplacement de l'équilibre de la réaction. Par conséquent, la caractérisation des phénomènes thermiques revêt une importance particulière lors d'une opération d'extrusion réactive.

Toutefois, la complexité d'un tel procédé n'a pas freiné la communauté scientifique à mener des recherches d'autant plus que l'intérêt économique que suscite ce type de procédé est important. Ainsi, plusieurs études ont été conduites afin d'approfondir la compréhension et de cerner les différents phénomènes mis en jeu. En conséquence, plusieurs modèles ont été développés que ce soit dans le domaine agroalimentaire ou dans le domaine des matériaux plastiques.

1.3.2 ETUDE BILIOGRAPHIQUE :

Le contrôle de la réaction dans un procédé d'extrusion réactive nécessite le contrôle du temps de séjour de chaque particule et le contrôle de la température en chaque point. De ce fait, une bonne connaissance des conditions d'écoulement, de la cinétique de réaction, de la rhéologie, du comportement thermique ainsi que les différents couplages entre ces phénomènes est requise afin de pouvoir modéliser et contrôler ce type de procédés.

Globalement, il existe deux principales approches pour la modélisation des extrudeuses bivis :

- La première repose sur une compréhension précise et s'intéresse à des phénomènes locaux, par exemple l'étude des écoulements dans les blocs malaxeurs (Noé, 1992 ; Szydlowski et White, 1988a et b), ou dans les vis à pas inverse (Szydlowski et White, 1987 ; Wang et White, 1989 ; Wang et al., 1989). Généralement, les modèles issus de cette approche sont bi ou tri-dimensionnels. Ils sont moins courants dans la littérature que les modèles mono-dimensionnels. Ceci est sûrement dû à la complexité des équations d'écoulements lorsqu'on passe à une dimension supérieure. Des méthodes telles que la méthode FAN (Flow Analysis Network) (Chu et Min, 1994a, b) basée sur une approche de type volumes finis sont utilisées lors du développement de ces modèles. Ces modèles sont impropres à la synthèse d'une loi de commande car ils sont souvent en régime stationnaire et trop complexes. Leur objectif est principalement l'aide à la conception des extrudeuses.
- ✓ La seconde approche quant à elle, repose sur une compréhension plus globale du procédé, prenant en compte les différentes zones fonctionnelles (pas direct, pas inverse, malaxeur,...) (Vergnes et al., 1998; Michaeli et Grefenstein, 1996). Ce type de modèle utilise une approche simplifiée privilégiant le calcul des valeurs moyennes, ce qui permettra de calculer rapidement les principaux paramètres de l'écoulement : pression, température, temps de séjour, taux de cisaillement,...etc. De nombreux auteurs utilisent ce genre d'approche car elle est plus simple à réaliser et donne de bons résultats. Les modèles élaborés à partir de cette approche, sont

des modèles mono-dimensionnels 1-D assez simples. Lorsqu'ils sont en régime stationnaire, ces modèles restent intéressants pour la conception des extrudeuses. Ils sont aussi intéressants lorsqu'ils servent de base à une représentation en régime transitoire nécessaire pour le calcul et l'élaboration de lois de commande.

Dans ce qui va suivre, on s'intéressera plus particulièrement aux travaux menés sur la modélisation 1-D du procédé d'extrusion bivis. La recherche bibliographique ne s'est pas limitée uniquement au domaine des matériaux plastiques, des travaux menés dans le domaine agroalimentaire ont aussi été cités. Différentes approches de modélisation sont présentées et commentées (approche génie des procédés, approche mécanique des milieux continus,...).

Les différents travaux seront présentés en regroupant les modèles selon deux types de modélisations :

- La modélisation stationnaire pour la conception des extrudeuses;
- La modélisation transitoire pour l'élaboration des lois de commande.

1.3.2.1 Modèles 1-D en régime stationnaire pour la conception

La modélisation 1-D est une approche globale permettant une description simplifiée de l'ensemble du procédé. Cette modélisation permet de calculer rapidement les principaux paramètres du procédé (pression, température, avancement de la réaction,...).

Lorsqu'on parle de modélisation des extrudeuses, on pense plus particulièrement à la modélisation des écoulements. En effet, l'une des difficultés majeures de la modélisation des procédés d'extrusion est la complexité des écoulements. Les écoulements rencontrés dans des géométries complexes telles que les extrudeuses rendent difficiles la compréhension et la modélisation de ce procédé. Modéliser et comprendre le phénomène d'écoulement est donc un point très important lors de la mise en oeuvre d'un modèle global.

La modélisation mono-dimensionnelle du procédé d'extrusion réactive, et plus particulièrement des écoulements, repose sur deux grandes tendances (Cassagnau, 1994) :

- La première se base sur les lois de la mécanique des fluides (équations de Navier-Stokes) et les comportements rhéologiques.
- ✓ La seconde repose sur l'approche de type génie des procédés qui consiste à représenter un écoulement à l'aide d'un réseau de réacteur idéaux (Villermaux, 1995). Généralement, cette approche génie des procédés nécessite la connaissance de la distribution des temps de séjour (DTS) : celle-ci caractérise le temps passé par la matière au sein de l'extrudeuse. Cette notion de DTS est expliquée en annexe (annexe 1).

A partir de ces deux grands axes, d'autres approches ont vu le jour en couplant l'approche mécanique des milieux continus avec celle du génie des procédés. Ce type d'approche est particulièrement utilisée pour la modélisation des DTS en extrudeuse bivis (De Graff et al., 1997 ; Gao et al., 1999 ; Poulesquen et al., 2004a et b).

Cependant, la majorité des modèles 1-D de la littérature décrivent les différents phénomènes ayant lieux dans l'extrudeuse en régime permanent (écoulement, transferts thermiques, profils de pression,...). Parmi ces modèles, on peut citer le modèle global développé conjointement par le CEMEF et l'INRA à partir d'études consacrées à la cuisson-extrusion des biomatériaux (Tayeb et al., 1992 ; Delamare, 1995 ; Della Valle et al., 1993 ; Vergnes et al., 1998). Ce modèle a été introduit dans le logiciel Ludovic[©] (*Logiciel pour l'Utilisation de DOuble VIs Corotative*) afin de simuler les écoulements, la réaction et les échanges thermiques le long de l'extrudeuse et ce pour différents profils de vis.

1.3.2.1.1 Modèles issus de l'approche génie des procédés

Dans une approche génie des procédés, l'extrudeuse peut être assimilée à un réacteur homogène de type continu représenté par sa distribution des temps de séjour (DTS). En utilisant cette démarche, on est amené à déterminer quelles associations de réacteurs idéaux connus (réacteur parfaitement agité, réacteur piston,...) rendent le mieux compte des phénomènes qui se manifestent le long des vis. Le but est de modéliser les écoulements le long de l'extrudeuse à travers la modélisation des distributions de temps de séjour.

Le concept de « *réacteur idéal* » fait appel à deux types d'écoulement simples dans les réacteurs en régime permanent (Villermaux, 1995) :

- L'écoulement «*Piston*» caractérisé par un temps de séjour unique pour toutes les molécules.
- L'écoulement en «*mélange parfait*» où les temps de séjour sont a priori quelconques et où l'on suppose la composition uniforme dans l'écoulement.

L'association de telles zones permet de décrire des dispositifs plus complexes : mélangeurs en cascade, réacteur piston à recyclage,...etc. Ainsi, beaucoup de travaux ont été basés sur des réacteurs idéaux, par exemple les réacteurs continus parfaitement agités (RCPA) et les réacteurs piston où la DTS de ces systèmes idéaux ou de leurs combinaisons peut être calculée théoriquement.

Cet intérêt à la DTS repose sur le fait que l'intervalle de temps pendant lequel la matière reste dans l'extrudeuse est important vis-à-vis de la cinétique de réaction. Ceci a un impact très important sur la qualité du produit (Gao et al., 1999). La modélisation des extrudeuses bivis, en utilisant ce concept a donc été largement utilisée (Todd, 1975 ; Chen et Hu, 1993 ; Auder, 1996; De Ruyck, 1997). Il est cependant difficile de représenter de tels écoulements avec une simple cascade de RCPA, d'autant plus, que selon le profil de vis choisi, on peut trouver plusieurs zones entièrement et partiellement remplies. Un mécanisme de reflux se crée au niveau de chaque zone entièrement remplie. Ces zones se situent au niveau des éléments restrictifs (vis inverse, filière,...).

Afin de représenter les phénomènes de reflux au sein de l'extrudeuse, Puaux et Ainser (1994) ont proposé un modèle d'écoulement basé sur la modélisation des DTS expérimentales. Ce dernier repose sur la combinaison d'un réacteur piston avec une cascade de RCPA en série de même volume avec un certain taux de reflux (Figure 1-15).



Figure 1-15: Modèle des réacteurs parfaitement agités en cascade à reflux

Le modèle élaboré est un modèle simple basé sur deux caractéristiques :

- La zone d'alimentation est modélisée par un réacteur piston caractérisé par un retard pur T_d .
- Dans la section où le malaxage a lieu, l'écoulement du polymère fondu est la somme de deux phénomènes :
 - (i) l'écoulement d'entraînement, dû au mouvement de rotation des vis, dans la direction de l'écoulement.
 - (ii) l'écoulement de pression, dû à la contre pression produite par les obstacles et qui a lieu dans les sections remplies, dans la direction opposée.

La rencontre de ces deux écoulements opposés est la base du processus de mélange dans l'extrudeuse bivis.

Le modèle ainsi développé est caractérisé par 4 paramètres : T_d le temps de retard du réacteur piston, n le nombre de réacteurs, σ est défini comme étant le rapport du reflux Q_B sur l'écoulement direct Q_D et τ le temps de résidence dans chaque réservoir ($\tau = \frac{V}{Q_D - Q_B}$). La méthode de Marquardt-Levenberg a été utilisée pour identifier les trois paramètres (T_d , σ et τ). Le nombre de réacteurs à mettre en série est donné arbitrairement jusqu'à ce que les résultats convergent. Les valeurs des paramètres identifiés à partir des DTS expérimentales réalisées pour différentes vitesses de rotation de vis et différents débits d'alimentation sont présentées. Toutefois, il est nécessaire de refaire l'étape d'identification à chaque fois qu'on change de DTS. Cet inconvénient limite fortement la validité du modèle. Ce dernier n'est donc valable qu'autour de la DTS identifiée (autour d'un point de fonctionnement).

Dans son étude, De Ruyck (1997) a modélisé la DTS d'un procédé d'extrusion de farine de blé. Le *Nacl* a été choisi comme traceur pour l'obtention des DTS expérimentales. L'auteur montre que géométriquement l'extrudeuse peut être assimilée à une cascade de 5 réacteurs de volumes différents, chaque réacteur étant subdivisé en une cascade de RCPA de même volume (Figure 1-16). La présence de la filière crée une restriction à l'écoulement de la matière ce qui induit l'apparition des débits de reflux. De ce fait, l'auteur a représenté le dernier réacteur par une cascade de trois RCPA avec des débits de reflux. Cependant aucune indication n'est donnée sur le calcul utilisé pour l'évaluation des taux de reflux.



Figure 1-16 : Représentation de l'extrudeuse par une cascade de RCPA (De Ruyck, 1997)

Enfin, on peut citer l'étude qu'ont menée Puaux et al. (2000) sur la modélisation des écoulements d'un polymère dans une extrudeuse bivis corotative. Les auteurs ont testé un certain nombre de modèles, permettant de décrire la DTS, tels que :

- Le modèle à dispersion axiale,
- Le modèle de cascade de RCPA,
- Le modèle de cascade de RCPA à simple et à double reflux,...

Le modèle de cascade de RCPA à double reflux a été développé pour représenter la contribution individuelle de chaque vis au phénomène du mélange axial. En effet, les réacteurs du modèle sont divisés en deux groupes, chaque groupe est traversé par des reflux

séparés représentant les deux écoulements de fuite qui apparaissent autour des deux vis (Figure 1-17).



Figure 1-17: Modèle des réacteurs parfaitement agités en cascade à double reflux (Puaux et al., 2000)

Finalement, les auteurs ont conclu que le modèle à dispersion axiale et le modèle de cascade de RCPA à reflux donnent les meilleurs résultats (Figure 1-18). Le modèle des RCPA à double reflux n'apporte donc pas une contribution significative pour la représentation des DTS expérimentales.



Figure 1-18 : Comparaison des DTS simulées et expérimentales (Puaux et al ; 2000) : a) Modèle de cascade de RCPA avec reflux ; b) Modèle à dispersion axiale

L'approche génie des procédés a aussi été utilisée pour modéliser en régime stationnaire l'avancement de la réaction le long d'une extrudeuse bivis (Michaeli et al., 1995 ; Chen et al., 1996). Comme nous l'avons déjà mentionné, les extrudeuses sont souvent utilisées comme réacteurs chimiques pour différentes applications, on peut citer en particulier les types de réactions suivants :

- La polymérisation en masse pour la préparation de polymères à partir de monomères.
- Le greffage de monomères sur des polymères permettant d'obtenir de nouveaux matériaux à propriétés spécifiques.
- > La formation de copolymères à partir de polymères existants.
- > Le contrôle de la distribution des masses moléculaires par dégradation peroxydique.

Ainsi, la modélisation de l'avancement d'une réaction par une approche génie des procédés a été décrite dans Villermaux (1995). Si la vitesse de réaction est une fonction linéaire de la concentration, les résultats des expériences avec traceurs (mesure de DTS, présenté en annexe 1) suffisent à prédire la conversion en régime stationnaire à la sortie du réacteur, la loi cinétique étant connue par ailleurs. En effet, l'avancement de la réaction ne dépend dans ce cas que du temps pendant lequel la réaction s'est poursuivie. On peut donc recourir, pour le calculer, à la seule connaissance de la DTS (E(t)). L'expression (Eq. 1-14) permet de calculer l'avancement \overline{X} d'une réaction à la sortie d'un réacteur en régime stationnaire.

$$\overline{X} = \int_{0}^{\infty} X_{RF}(t) \cdot E(t) dt \qquad \text{Eq. 1-14}$$

où $X_{RF}(t)$ est l'avancement en réacteur fermé.

Cette expression a été utilisée par Michaeli et al. (1995) pour calculer le taux de conversion (sous conditions isothermes) moyen \overline{X} , lors de l'étude qu'ils ont menée sur le processus de polymérisation du polyamide 6 et du polystyrène le long d'une extrudeuse bivis corotative. Différents réacteurs idéaux ont été utilisés pour décrire le processus de conversion. Les auteurs ont choisi les réacteurs suivants :

- Réacteur continu parfaitement agité (RCPA).
- Cascade de RCPA.
- Réacteur piston.

Les auteurs (Michaeli et al., 1995) ont développé deux types de modèles pour le calcul des taux de conversions des réactions du premier ordre (polymérisation du nylon et du polystyrène). Le premier est un modèle de réacteur piston et le second et un modèle de cascade de RCPA. Une comparaison entre les taux de conversion mesurés et calculés a été faite pour différentes températures. Les auteurs concluent que les résultats obtenus avec le modèle de cascade de RCPA sont plus satisfaisants que ceux obtenus pour le réacteur piston. Les différents résultats illustrés dans l'article (Michaeli et al., 1995), sont globalement satisfaisants.

Kim et White (1994) ont aussi adopté l'approche génie des procédés pour étudier la transestérification des EVA dans une extrudeuse bivis corotative. L'étude consiste à étudier la réaction en utilisant différents profils de vis composés essentiellement par des éléments à pas direct, inverse et des blocs malaxeurs. Les différents profils ont été décrits en combinant des réacteurs idéaux tels que le réacteur piston et le RCPA. Le but final a été de comparer les taux de conversion obtenus par le modèle à ceux obtenus sur une extrudeuse en sortie de filière. Les auteurs utilisent le logiciel Akro co Twin Screw[©] afin de déterminer les régions pleines ou partiellement remplies le long de l'extrudeuse. Ils ont donc accès aux profils des taux de remplissage et de pression. Cependant, aucune procédure de calcul n'est présentée pour la détermination du taux de conversion.

Enfin, Ganzeveld et al. (1994) ont étudié la polymérisation en masse du nbutylméthacrylate dans une extrudeuse bivis contrarotative. Le principe global de leur modélisation consiste à décrire les chambres en C par des RCPA et ensuite écrire les bilans de masse, de matière et thermique pour chaque chambre en C. Un modèle cinétique a été développé et la masse molaire moyenne en masse est définie, à partir de données expérimentales, comme étant une fonction linéaire du taux de conversion. Les auteurs obtiennent de bons résultats, sauf dans le cas où la vitesse de rotation des vis est faible.

Globalement, les différents modèles utilisés pour la modélisation des écoulements à travers la modélisation des DTS nécessitent deux à trois paramètres ajustables afin de représenter au mieux les DTS expérimentales. Ces paramètres sont généralement le temps de retard, le nombre de réacteurs et un autre paramètre de forme. Par ailleurs, aucune indication n'est donnée sur l'utilisation de ces paramètres, une fois qu'ils ont été identifiés, pour obtenir un modèle prédictif valable pour toutes les DTS expérimentales quelles que soient les

conditions opératoires. Le choix des réacteurs par rapport au profil de vis utilisé ainsi que leur disposition est souvent mal décrit dans ce type d'approche.

Toutefois, les résultats obtenus montrent que l'ensemble des modèles testés décrivent correctement les DTS expérimentales. Certains de ces modèles sont plus précis que d'autres mais ils ne sont fondés que sur le lissage de courbes expérimentales par des modèles de réacteurs . De ce fait, ils ne peuvent pas être prédictifs.

D'un point de vue des concepts de l'automatique, la DTS n'est autre qu'une réponse impulsionnelle du système autour d'un point de fonctionnement. On peut dire qu'elle représente la réponse impulsionnelle d'un modèle linéarisé de l'écoulement autour de ce point de fonctionnement et qu'elle n'est donc valide que localement pour calculer le taux de conversion d'une réaction chimique. Cette contrainte rend les modèles se basant sur la DTS pour le calcul du taux de conversion difficilement utilisable pour des grandes plages de fonctionnement. Car pour chaque point de fonctionnement (débit d'alimentation, vitesse des vis,...) la connaissance de la DTS correspondante est nécessaire afin de déterminer le nombre de réacteurs à mettre en cascade ainsi que leurs volumes.

1.3.2.1.2 Modèles issus de l'approche mécanique des milieux continus :

Une autre manière de modéliser un procédé d'extrusion consiste à utiliser l'approche de la mécanique des milieux continus. Cette approche fait appel aux lois de la mécanique des fluides (équations de Navier-Stokes) et des comportements rhéologiques. Elle peut être utilisée pour élaborer des modèles mono, bi, voire tri-dimensionnels.

1.3.2.1.2.1 Hypothèses simplificatrices :

Il est très difficile de modéliser les écoulements dans les extrudeuses du fait que la géométrie y est instationnaire et qu'il n'existe pas de repère simple dans lequel on puisse considérer l'écoulement comme indépendant du temps. La Figure 1-19 illustre les évolutions de la géométrie du système, suivant le type de repère choisi. Si l'on choisit un repère fixé à l'une des deux vis, le fourreau va tourner autour de la vis fixe entraînant la seconde en

rotation autour de la première, dont le chenal va être régulièrement balayé par le filet de sa voisine (Tayeb et al.,1992). Ainsi, pour négliger le mouvement relatif d'une vis par rapport à l'autre, il est nécessaire de supposer que les deux vis sont fixes et que le fourreau tourne autour d'elles. Cette hypothèse permet une approche simplifiée des écoulements mais elle présente l'inconvénient majeur de négliger le mouvement relatif des vis. Ainsi, tous les phénomènes qui sont liés à la zone d'interpénétration sont mal pris en compte.

Si de plus on considère que l'écoulement est peu perturbé par la zone d'interpénétration l'écoulement devient uniforme, c'est à dire indépendant de la coordonnée z (selon la direction de l'écoulement).



Figure 1-19: Choix d'un repère fixe (Tayeb et al., 1992)

Une autre hypothèse classique, commune celle-ci avec l'extrusion monovis, consiste à dérouler les chenaux pour se ramener à une configuration plane (Figure 1-20). Cette hypothèse entraîne l'assimilation du fourreau à un plan qui se déplace en biais au-dessus des chenaux rectilignes.

Les hypothèses supplémentaires suivantes, communes à la plupart des auteurs, sont également utilisées :

- Forces de masse et d'inertie négligées ;
- Fuites négligées ;



Figure 1-20: Représentation des chenaux déroulés (Wang et White, 1989)

Pour un fluide visqueux ayant un comportement newtonien, l'écoulement est régi en régime stationnaire par les équations suivantes :

$$\frac{\partial P}{\partial x} = 2 \frac{\partial}{\partial x} \left(\eta \frac{\partial u}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\eta \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\eta \left(\frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial x} \right) \right)$$
Eq. 1-15

$$\frac{\partial P}{\partial y} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\eta \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) \right) + 2 \frac{\partial}{\partial y} \left(\eta \frac{\partial v}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\eta \left(\frac{\partial v}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial y} \right) \right)$$
Eq. 1-16

$$\frac{\partial P}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\eta \left(\frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\eta \left(\frac{\partial v}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial y} \right) \right) + 2 \frac{\partial}{\partial z} \left(\eta \frac{\partial w}{\partial z} \right)$$
Eq. 1-17

$$\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial w}{\partial z} = 0$$
 Eq. 1-18

Les analyses les plus simples consistent à considérer un écoulement 1-D newtonien suivant la direction z, avec une composante unique de vitesse w(z), on arrive à la relation classique (Eq. 1-19) (Booy, 1980 ; Tayeb et al., 1989 ; Potente et al., 1990).

$$Q_{ch} = Q_c - Q_p \qquad \qquad \text{Eq. 1-19}$$

Le débit le long d'un chenal résulte alors de la différence entre le débit de cisaillement Q_c et le débit de contre-pression Q_p . Plus de détails seront donnés dans le chapitre 2 pour le calcul de ces débits.

1.3.2.1.2.2 *Etude bibliographique :*

De nombreux modèles 1-D et 2-D existent dans la littérature, que ce soit pour des fluides newtoniens, non-newtoniens, dans des conditions isothermes ou non. Pour les éléments de vis, les modèles proposés ont d'abord été des approches 1-D pour fluides newtoniens (Booy, 1980) et non-newtoniens (Tayeb et al., 1988 ; Potente et al., 1990), puis des modèles 2-D faisant appel aux éléments finis (Wang et al., 1989 ; Noé, 1992). Une revue des différentes méthodes utilisées est donnée dans l'article de Chen et White (1994), que ce soit pour les éléments de vis ou les blocs malaxeurs.

La première tentative d'interprétation et de modélisation du mécanisme d'écoulement au sein d'un bloc de malaxeurs a été réalisée par Werner (1976) à partir d'une approche 1-D. Pour expliquer le mécanisme d'écoulement dans les malaxeurs, Werner considère seulement l'écoulement circonférentiel auteur d'un élément isolé (Figure 1-21). Du fait de la géométrie et de la vitesse relative du fourreau, cet écoulement est caractérisé par un pic de pression situé en amont du sommet du malaxeur (point B, Figure 1-21). Le décalage des sommets des malaxeurs les uns par rapport aux autres, provoque un décalage des pics de pression qui entraîne l'existence d'un gradient de pression axial, et donc un débit axial (Figure 1-22).



Figure 1-21 : Ecoulement circonférentiel autour d'un malaxeur (a) profil de pression correspondant (b) (Vergnes et Chapet, 2000)



Figure 1-22 : Décalage des profils de pression dans un bloc de malaxeurs (Werner, 1976)

Werner applique la théorie qui consiste à dérouler la géométrie des vis dans un plan en considérant le malaxeur fixe et le fourreau mobile. L'auteur calcule le profil de pression pour un malaxeur isolé, en ne considérant qu'une seule composante de vitesse v(x,y), et en prenant les hypothèses de la lubrification hydrodynamique. Il calcule alors ce profil de vitesse v(x,y), dont l'intégration sur la profondeur du chenal fournit une valeur du débit circonférentiel Q_X . Ce dernier permet alors de remonter à un gradient de pression circonférentiel. L'intégration du gradient de pression sur tout le chenal du malaxeur fournit alors un profil de pression fortement dépendant du jeu existant entre le sommet du malaxeur et le fourreau. Werner limite toutefois ses calculs au profil de pression circonférentiel, sans s'intéresser à la perte de charge dans l'axe des vis (suivant z).

Une fois que le profil de pression circonférentiel soit fixé pour un disque isolé, il faut ensuite déterminer le gradient de pression axiale $\partial P/\partial z$ pour l'ensemble des éléments ayant le même angle de décalage et constituant ainsi ce qu'on appelle un bloc de malaxeurs. Si ce bloc n'est pas rempli, la perte de charge dans ce dernier est nulle. Si au contraire, il est entièrement rempli, le seul décalage des profils de pression circonférentiels ne suffit alors plus à générer le débit axial ; il faut lui superposer un gradient axial, crée par le débit imposé qui traverse le système. Le principe requis pour calculer ce dernier repose sur l'écriture de la conservation du débit axial total pour le bloc considéré. Pour cela, Delamare (1995) a utilisé une démarche qui consiste à découper chaque chenal en volumes élémentaires et, pour chacun de ces volumes, à écrire la conservation des débits axiaux. Pour plus de détails sur cette méthode de calcul, nous laissons le lecteur se référer à la thèse, Delamare (1995). D'autres approches théoriques, utilisant des méthodes de volumes finis, ont été développées pour modéliser les écoulements au niveau des malaxeurs. Ces méthodes ont été élaborées en considérant les approximations de la lubrification hydrodynamique, dans la géométrie plane (Szydlowski et al., 1987 ; Szydlowski et White, 1988a et b) ou la géométrie cylindrique (Noé, 1992 ; Vergnes et Noé 1992). Les auteurs considèrent les malaxeurs fixes et le fourreau mobile, et négligeant la zone d'interpénétration. L'écoulement est isotherme et le polymère suit un comportement newtonien équivalent.

Par ailleurs, des modèles globaux ont été développés en se basant sur l'approche mécanique des milieux continus. Yacu (1985) peut être considéré comme étant le premier à proposer un modèle global capable de prédire des profils axiaux de température et de pression pour un procédé d'extrusion bivis en prenant en compte les différentes zones fonctionnelles (zone de transport à l'état solide, zone de mise en pression, zone de cisaillement à l'état fondu). La prédiction de ces profils suppose la connaissance de la géométrie de l'extrudeuse ainsi que les caractéristiques thermophysiques et rhéologiques de la matière (farine de blé). Pour cela, Yacu développe un modèle rhéologique prenant en compte la teneur en eau, la teneur en graisse et l'effet rhéofluidifiant de la matière. Le modèle repose sur une analyse monodimensionnelle des transferts de chaleur et considère que l'ensemble des paramètres restent constant dans une section droite du fourreau.

Les principales hypothèses de son étude sont :

- La matière a un comportement non-newtonnien, son modèle rhéologique prend en compte les teneurs en eau et en graisse de la matière ainsi que l'effet de la température.
- Le régime est permanent.
- L'écoulement est supposé laminaire et fortement visqueux.
- Les effets de la gravité sont négligeables.
- > Il n'y a pas d'échange de chaleur entre les vis et la matière.
- > Seul l'écoulement axial de la matière est pris en compte.

De plus, l'auteur considère que la viscosité de la matière reste constante dans chaque zone des vis (chenal et jeux géométriques). Il définit un taux de cisaillement moyen $\dot{\gamma}$ qui englobe le cisaillement dans le chenal et dans les différents jeux géométriques tel que :

$$\dot{\gamma} = N \cdot \sqrt{\frac{C}{V_{p}}}$$
 Eq. 1-20

où $C(m^3)$ est une constante géométrique et $V_p(m3)$ le volume du chenal des vis.

Les résultats obtenus montrent qu'un écart entre 1 et 13 % existe entre les températures mesurées et calculées. La validation du modèle a été réalisée au niveau de la filière. Aucun autre point de mesure n'a été réalisé le long de l'extrudeuse. Cependant, cette étude montre l'intérêt d'avoir un modèle global permettant d'approfondir la compréhension de tels procédés en utilisant des approches simples.

Un autre modèle global utilisant cette approche est celui intégré dans le logiciel Ludovic[©]. Ce dernier permet de décrire des écoulements à l'état fondu dans les extrudeuses bivis corotatives en régime stationnaire. La fusion de la matière n'est pas simulée, elle est supposée avoir lieu dans le premier élément restrictif (élément à pas inverse ou malaxeur) et être instantanée. La modélisation des écoulements est réalisée séparément pour chaque type de vis et la filière. Ludovic[©] est donc organisé par modules, chaque module correspond à un type particulier d'élément de vis (pas direct, pas inverse, élément malaxeur, filière). La mise en série des différents modules spécifiques conduit à un modèle d'ensemble de la machine. Les variables obtenues sont des valeurs moyennes statiques (taux de cisaillement, viscosité, température,...), la température étant considérée uniforme dans chaque chambre en C. Le principe général de Ludovic[©] est similaire à celui proposé par Michaeli et Grefenstein (1996) pour modéliser un procédé d'extrusion bivis.

L'approche théorique sur laquelle est basée la réalisation de ce logiciel consiste en un modèle global 1-D newtonien équivalent, stationnaire, décrivant l'ensemble du procédé de la zone d'alimentation à la filière. Le modèle utilise l'approximation du fourreau tournant et des vis fixes. La géométrie des chambres en «C» est approchée par un système de Couette avec effet de bord, chacune d'elle étant assimilée à une portion cylindrique de chenal rectangulaire

immobile (Figure 1-23). Des coefficients correcteurs prennent en compte la géométrie spécifique du chenal. Ceux-ci sont fonction du rapport largeur du chenal/ profondeur (Booy, 1980). La zone d'interpénétration est considérée comme une zone de perte de charge, calculée comme un écoulement de Poiseuille dans une géométrie équivalente. Les forces de masse et d'inerties sont négligées, de même que les fuites aux sommets des filets de vis et aucun glissement de parois n'existe. Pour les malaxeurs, un profil de pression 1-D est calculé dans la direction circonférentielle, le décalage de ces profils crée un gradient de pression, donc un débit axial. L'évolution de la température entre deux éléments successifs est calculée à partir de l'équation du bilan d'énergie basé sur la température moyenne.



Figure 1-23 : Géométrie approchée d'une chambre en C (Agassant et al., 1996)

Cette approche a aussi été utilisée pour modéliser des opérations d'extrusion réactive. Toutefois, comme nous l'avons souligné, la modélisation d'une opération d'extrusion réactive nécessite de résoudre les couplages entre les conditions de l'écoulement dans l'extrudeuse (température, temps de séjour, rhéologie du polymère fondu,...), la réaction chimique (cinétique, chaleur dissipée,...) et les échanges thermiques (convection, dissipation visqueuse). Ce couplage peut être négligé dans le cas où le degré d'avancement de la réaction chimique n'impliquerait pas une variation importante sur la viscosité du produit. Cette approche a été appliquée, par exemple, à la transestérification des EVA du fait de la faible dépendance de la viscosité vis-à-vis du taux de conversion (Berzin, 1998).

Par contre, pour une réaction ayant une influence sur la viscosité du système (dégradation, polymérisation), il est nécessaire de coupler réaction/écoulement. Poulesquen (2001) modélise, toujours à partir du logiciel Ludovic[©], la polymérisation de l'ɛ-caprolactone en se basant sur les lois rhéocinétiques développées par Gimenez et al., (2000a). Au cours de

cette réaction la viscosité varie de manière très importante. Par conséquent, la prise en compte du couplage entre les paramètres de l'écoulement et l'avancement de la réaction est nécessaire. L'auteur intègre les différentes lois cinétiques et rhéologiques au niveau de Ludovic©. Il détermine ainsi les évolutions de la pression, de la température (en tenant compte de la chaleur de réaction, de la dissipation visqueuse et du transfert thermique), du taux de conversion et du taux de remplissage lorsque la polymérisation se déroule.

Le logiciel Ludovic[®] a aussi été utilisé par Berzin et al. (2000) afin de modéliser la dégradation du polypropylène peroxydé dans une extrudeuse bivis co-rotative. Au cours de cette réaction, la masse molaire du polymère et donc le comportement rhéologique du système réactif évoluent de manière importante. L'introduction d'un peroxyde, qui en se décomposant entraîne l'apparition des radicaux libres, se traduit par une diminution de la masse moléculaire. Ceci provoque une chute de la viscosité d'une à deux décades. Cette chute a une influence très importante sur l'évolution des paramètres thermomécaniques de l'écoulement, d'où la nécessité de mettre en place des couplages forts entre la thermomécanique de l'écoulement, la cinétique de réaction et les modifications introduites par celle-ci sur la masse moléculaire. La validation du modèle a été faite pour différentes conditions opératoires (débit d'alimentation, vitesse de rotation des vis, et concentration initiale du peroxyde) et l'accord entre les mesures et le calcul est satisfaisant.

De leur côté, Key et White (1996) ont utilisé la même technique pour modéliser la polymérisation de l' ε -caprolactame pour obtenir du polyamide 6. En effet, les auteurs utilisent le logiciel de simulation Akro-co-Twin Screw pour l'obtention des paramètres d'écoulement. Ils utilisent donc les équations de la mécanique des fluides auxquels ils couplent une cinétique chimique. De la même manière que dans le logiciel Ludovic[®], leur calcul se déroule pas à pas le long du profil de vis. Ils calculent ainsi les différentes variables d'écoulement et cinétique du procédé (pression, taux de remplissage, température matière, taux de conversion,...) durant le processus de polymérisation en prenant en compte la dissipation visqueuse, le transfert thermique et la chaleur de réaction. Toutefois, les auteurs ne donnent pas de détails sur le calcul lorsque la polymérisation a lieu ni sur le couplage écoulement/réaction. En effet, ils ne proposent qu'une loi cinétique pour évaluer le taux de conversion sans donner lois rhéocinétiques pouvant calculer l'évolution de la viscosité ou les masses moléculaires. Néanmoins, les résultats obtenus montrent une bonne corrélation entre les taux de conversion

mesurés et calculés. Ils comparent également les longueurs remplies dans l'extrudeuse après ouverture de celle-ci, et obtiennent une bonne description de cette longueur.

Kim et White (1997) modélisent, quant à eux, la dégradation du polypropylène combinée au greffage de l'anhydride maléique, à partir du logiciel de simulation Akro-co-Twin Screw. Des simulations ont été réalisées pour le calcul de la masse moléculaire avec différentes vitesses de vis et concentrations en peroxyde. Lors de la comparaison entre les valeurs simulées et expérimentales, les auteurs n'observent pas les mêmes évolutions lorsque la vitesse des vis augmente. De plus, les valeurs simulées avec le modèle sont surestimées par le calcul, que ce soit pour l'influence des vis ou la concentration en peroxydes. Selon les auteurs, l'erreur existante entre les résultats simulés et expérimentaux est due aux lois cinétiques utilisées. Ils indiquent que les lois employées sont obtenues pour un réacteur fermé (batch). De ce fait, elles ne rendent pas compte de ce qui se passe réellement dans l'extrudeuse (réacteur continu). Un autre point peu clair est le couplage entre les conditions d'écoulements et la chimie. Aucun modèle rhéologique, permettant de suivre l'évolution de la viscosité au cours de la réaction, n'a été présenté.

En résumé, on peut dire que la modélisation d'une réaction chimique au sein de l'extrudeuse nécessite la connaissance des paramètres thermomécaniques de l'écoulement ainsi que les modèles cinétiques et rhéologiques de la réaction. Le couplage entre la thermomécanique de l'écoulement et la réaction chimique n'est possible que si toutes les lois sont parfaitement connues. Ce couplage devient nécessaire dans le cas où la réaction influence d'une manière significative la viscosité du système (polymérisation, dégradation,...).

1.3.2.1.3 Modèles issus d'une approche mixte :

En voulant combiner les avantages que peuvent apporter les deux approches citées cidessus, certains auteurs ont élaboré des modèles en couplant l'approche mécanique des milieux continus à celle du génie des procédés. Ce couplage consiste en une prise en compte plus détaillée des écoulements par la définition de l'agencement des réacteurs idéaux constituant le modèle d'écoulement.

De Graff et al. (1997) modélisent la DTS dans une extrudeuse bivis contrarotative en associant aux différentes zones constituant la machine un réacteur chimique idéal. Les auteurs

considèrent que l'extrudeuse se compose de quatre zones : la zone d'alimentation, la zone partiellement remplie, la zone de transition, la zone entièrement remplie et enfin la filière (Figure 1-24).



Figure 1-24 : les différentes zones de l'extrudeuse (d'après De Graff et al. ,1997)

Pour la modélisation les auteurs posent les hypothèses suivantes :

- Chaque chambre en *C* se comporte comme un RCPA.
- Après une rotation des vis, le contenu de chaque chambre en *C* est transféré à la chambre suivante de la même vis.
- Les écoulements de pression sont nuls dans la zone partiellement remplie.
- La filière est représentée par un réacteur piston.
- La zone d'alimentation se comporte comme un RCPA.
- La densité de la matière est constante dans la zone partiellement remplie mais elle est différente de celle de la zone pleine.
- Les changements de densité ont lieu au niveau de la zone de transition.

Partant de ces hypothèses, les auteurs établissent les bilans matière dans chaque zone afin de décrire l'évolution de la concentration d'un traceur le long des vis. Le modèle développé permet de prédire les DTS globales du système pour différents débits d'alimentation et différentes vitesses de rotation, ceci sans paramètre ajustable. Cette procédure de calcul est très intéressante et a été validée sur la gélatinisation de l'amidon et sur le greffage du polystyrène sur l'amidon. Une autre étude intéressante sur la modélisation de la DTS dans un procédé d'extrusion bivis a été menée par Gao et al. (1999). Ces derniers considèrent que les zones partiellement remplies de l'extrudeuse bivis corotative peuvent être modélisées par un élément retard (réacteur piston). D'un autre côté, ils considèrent que la distribution du traceur le long de l'extrudeuse est essentiellement causée par la présence des zones entièrement remplies. Ces zones peuvent être modélisées par une combinaison de réacteur piston et de cascade de RCPA. Ils aboutissent alors à l'expression donnée si dessous pour décrire la DTS (Eq. 1-21) :

$$E(t) = \frac{a^3}{2} (t - t_d)^2 \exp(-a(t - t_d))$$
 Eq. 1-21

où *a* est le facteur de forme de la DTS proportionnel au débit d'alimentation et doit être déterminé expérimentalement. t_d est le temps de retard et est calculé par la relation suivante :

$$t_d = \bar{t} - \frac{3}{a}$$
 (\bar{t} est le temps de séjour moyen.) Eq. 1-22

Ce modèle est en bon accord avec les données expérimentales mais nécessite des paramètres ajustables et ne prend pas en compte les détails de la géométrie de l'extrudeuse.

Toutefois, il est intéressant de noter que Gao et al. (1999) ont présenté un nouveau concept qui consiste à transformer la DTS pour donner lieu à deux nouvelles distributions :

✓ La distribution des volumes de séjours (RVD).

$$g(v) = \frac{E\left(\frac{v}{Q}\right)}{Q} = \frac{a_v^3}{2} (v - v_d)^2 exp - a_v (v - v_d)$$
 Eq. 1-23

où Q est le débit d'alimentation, N la vitesse de rotation des vis et a_v, v_d respectivement le facteur de forme et le retard de volume de la RVD

✓ La distribution des tours de séjours (RRD).

$$h(n) = \frac{E\left(\frac{n}{N}\right)}{N} = \frac{a_n^3}{2}(n - n_d)^2 exp - a_n(n - n_d)$$
 Eq. 1-24

où a_n et n_d sont respectivement le facteur de forme et le retard de tours de la RRD

Les variables d'intégration dans les fonctions h(n) et g(v) sont les tours de vis (n) et le volume de la matière (v), leur relation avec le temps est donnée par : t=n/N=v/Q. Les variables n_d et v_d représentent respectivement les tours de retard et les volumes de retards.

Les auteurs montrent que le processus d'extrusion réactive peut être séparé en deux phénomènes physiques : le transport et le mélange. La RRD permet de donner un aperçu sur le comportement du transport le long de l'extrudeuse tandis que la RVD permet de fournir des informations sur le processus de mélange.

Les résultats obtenus à partir de l'étude menée sur la RVD et la RRD indiquent que le débit spécifique (Q/N) est un paramètre clé pour déterminer les conditions d'écoulement dans les vis de l'extrudeuse. En effet, le débit spécifique est un estimateur du degré de remplissage dans les sections partiellement remplies, ce dernier affecte alors le temps de retard et la forme de la DTS. Pour un même débit spécifique et la même viscosité de la matière, les formes de la RDD et RVD restent les mêmes. Par contre, il faut garder à l'esprit que la variation de la vitesse affecte considérablement la rhéologie et la cinétique d'une réaction à travers les dissipations visqueuses.

Un autre point signalé par cette étude est que pour différentes conditions opératoires et un profil de vis donné, les formes de la RVD obtenues sont équivalentes. D'après les auteurs, ceci indique que la distribution axiale du traceur n'est pas fonction des conditions opératoires mais plutôt du profil de vis utilisé. Ils indiquent alors qu'on peut considérer la forme de la RVD comme étant une mesure du degré de mélange dans l'extrudeuse. Ils concluent alors que la seule façon de changer significativement la forme de la RVD est de changer le profil des vis. Les résultats obtenus à travers l'étude de ces deux nouvelles distributions semblent être intéressants et permettent d'avoir une idée plus précise sur le processus de transport et de mélange. Toutefois, il est nécessaire de faire d'autres études expérimentales avant de tirer des conclusions définitives. Jusqu'à présent nous n'avons trouvé aucune autre étude qui confirme les différentes conclusions de l'article de Gao et al. 1999.

Plus récemment, Poulesquen et al. (2004a et b) ont adopté une approche mixte pour déterminer la DTS d'un procédé d'extrusion bivis corotatif. La méthode consiste à coupler l'approche thermomécanique afin de déterminer les zones entièrement et partiellement remplies, puis utiliser des réacteurs idéaux pour modéliser le temps de séjour dans les différentes sections. Le calcul de la DTS est alors obtenu par le produit de convolution de chaque zone locale. Afin d'éviter l'utilisation de paramètres ajustables dans le modèle, les auteurs ont sélectionné des réacteurs idéaux dont la DTS est seulement fonction du temps de résidence moyen. Les différents paramètres thermomécaniques (pression, température, temps de séjour moyen...) le long des vis sont calculés au moyen du logiciel Ludovic[®]. Les zones partiellement remplies sont modélisées par un réacteur piston. D'autre part, dans les zones entièrement remplies, selon le type des éléments constituant le profil de vis (pas direct, pas inverse, éléments malaxeurs), des réacteurs différents peuvent être choisis. Le Tableau 1-2 résume le type de réacteur utilisé dans chaque zone (Poulesquen et al., 2004b) :

Elément de vis	Réacteur idéal
Pas inverse entraînant la fusion	Cascade de 3 RCPA en série
Pas inverse quelconque	Cascade de 5 RCPA en série
Blocs malaxeurs	
Décalage positif	RCPA + t_{min} (t_{min} : temps de retard pur local)
Décalage négatif	
Nombre de malaxeurs $n_d \leq 4$	$\mathbf{RCPA} + t_{min}$
Nombre de malaxeur $n_d > 4$	Cascade de n_d RCPA
Filière jonc	Réacteur Tubulaire
Filière plate	Réacteur de Poiseuille Plaque

Tableau 1-2 : Association des éléments de vis et réacteurs idéals (Poulesquen et al., 2004b)

Globalement, les résultats obtenus avec ce modèle montrent une bonne corrélation entre les DTS simulées et les DTS expérimentales. Le modèle peut prédire à la fois les DTS locales et globales pour différentes conditions opératoires. Le point positif de cette étude est que le modèle ne possède aucun paramètre ajustable. Toutefois, il faut noter que le choix des réacteurs pour chaque élément de vis nécessite une étude expérimentale très poussée basée sur les données expérimentales des DTS locales, partielles et globales, ainsi que sur les visualisations d'écoulements dans les blocs malaxeurs. On peut donc estimer que le choix des réacteurs peut être valable que pour les profils de vis utilisés dans cette étude mais pas nécessairement pour tous les profils.

1.3.2.2 Modèles 1-D dynamiques pour le contrôle1.3.2.2.1 Modèles basés sur les équations de bilan

Les modèles élaborés à partir de cette approche sont de loin les plus complets bien que basés sur l'hypothèse 1-D. Ils reposent sur l'écriture des bilans de matière et d'énergie. On aboutit alors à un système d'équation aux dérivées partielles (EDP). De ce fait, les différentes variables d'état du procédé (taux de remplissage, pression, température...) sont décrits en régime dynamique, contrairement aux modèles statiques cités précédemment. D'un point de vue de l'automatique, il est clair que le fait d'avoir un modèle global, décrivant le comportement dynamique du procédé, permet d'envisager l'élaboration et la synthèse de lois de commande. D'autant plus que le procédé d'extrusion est un procédé très complexe, fortement non-linéaire, et à paramètres répartis. Ceci rend les méthodes classiques de commande inefficaces, d'où l'intérêt d'avoir un modèle global dynamique pour l'élaboration des lois de commande plus sophistiquées.

D'après la recherche bibliographique menée, nous avons constaté que les modèles de ce type sont peu nombreux. Parmi ces modèles, on peut citer le modèle développé par Kulshrestha et al. (1992) pour un procédé d'extrusion de farine de blé. Le développement du modèle repose sur une étude statique menée au préalable sur le même procédé (Kulshrestha et al., 1991). Cette étude avait pour but de développer un modèle statique du procédé et en même temps identifier quelques paramètres tels que la densité de la matière, le coefficient d'échange de chaleur,...etc.

Les auteurs considèrent que pour un profil de vis complexe, l'extrudeuse peut être divisée en trois zones bien distinctes (Kulshrestha et al., 1991) :

- La zone de convoyage solide (SCZ) : c'est une zone partiellement remplie dans laquelle la matière est à l'état solide. Les échanges thermiques entre le fourreau et la matière sont faibles, les débits de reflux sont nuls et la pression est égale à la pression atmosphérique (P = P₀).
- La zone de fusion partiellement remplie (PFMZ): cette zone a les mêmes caractéristiques que la zone de convoyage solide à savoir que les débits de reflux sont nuls, faibles échanges thermiques, P=P₀ ... etc. La seule différence se situe au niveau de l'état de la matière. En effet, dans cette zone la matière change de phase, elle passe d'un état solide à un état fondu.
- La zone de fusion entièrement remplie (FFMZ) : comme son nom l'indique, cette zone est entièrement remplie, les échanges thermiques sont importants entre le fourreau et la matière et il y a création d'un gradient de pression ce qui provoque la circulation des débits de reflux.

L'élaboration de ce modèle repose sur les hypothèses suivantes :

- Un écoulement à une dimension.
- Une frontière mobile lm(t) entre la zone de convoyage et la zone de fusion (Figure 1-25).
- Des pertes de chaleur négligeable sur l'axe des vis.
- Une capacité calorifique spécifique et une densité constantes.
- La matière a un comportement non-newtonien et les conditions d'écoulement sont fortement non-isothermes.



Figure 1-25 : Représentation schématique de l'extrudeuse (Kulshrestha et al., 1991)

Lors du développement du modèle dynamique, Kulshrestha et al. (1992) choisissent un profil de vis simple de telle sorte que l'extrudeuse ne comporte que deux zones : la SCZ et la FFMZ. Ils écrivent ainsi les bilans de matière et d'énergie dans chaque zone.

□ Modélisation des écoulements :

Le bilan matière est donné par les équations aux dérivées partielles suivantes :

Zone de convoyage solide :

Le comportement dynamique dans cette zone est donné par le taux de remplissage f le long du fourreau. Le bilan de matière pour un volume élémentaire de longueur Δz , est décrit par l'équation suivante :

• Bilan de matière dans la zone partiellement remplie :

masse accumulée = masse entrante – masse sortante

$$\frac{2V_c\rho_m}{B}\frac{\partial f}{\partial t}\Delta z = 2V_cfN\rho_m - 2V_cN\rho_m\left(f + \frac{\partial f}{\partial z}\Delta z\right) \Longrightarrow \frac{\partial f}{\partial t} = -BN\frac{\partial f}{\partial z}$$
Eq. 1-25

où f est le taux de remplissage, V_c le volume de la chambre en C, N la vitesse de rotation des vis, ρ_m la masse volumique et B le pas de vis.

Zone de fusion (état fondu) :

Dans cette zone, le débit net est le même dans la totalité de la zone. Ceci découle directement de l'hypothèse indiquant que la densité de la matière est constante tout le long de l'extrudeuse et que la zone de fusion est entièrement remplie. Le débit net est donc égal au débit de la filière F_d . Le comportement dynamique de cette zone est régi par son bilan thermique transitoire et par la variation temporelle de sa frontière l_m (variation de la longueur)

Bilan de matière dans la zone remplie :

Pour un mélange incompressible, le bilan de matière se réduit à l'équation de continuité suivante :

$$F_d = 2V_c N\rho_m - A_P \rho_m \frac{1}{\eta} \frac{dP}{dz}$$
 Eq. 1-26

avec A_P une constante, η la viscosité de la matière et P la pression.

La résolution des différentes EDP nécessite la connaissance des conditions initiales et des conditions aux limites. Dans ce cas, les conditions aux limites concernent la frontière entre la zone à l'état solide et fondu. En effet, durant les phases transitoires, la longueur de la zone de fusion l_m varie avec le temps. Ceci est dû à la différence qui existe entre le débit entrant F_s et le débit sortant F_d au niveau de la zone de fusion (Figure 1-25).

□ Modélisation des échanges thermiques :

Le bilan d'énergie est écrit en négligeant la chaleur dégagée lors du changement de phase de la matière et la chaleur dégagée par les réactions physico-chimiques. D'autre part, contrairement à Yacu (1985) et Martelli (1982), Kulshrestha et al. (1991, 1992) estiment que les dissipations visqueuses dans les zones partiellement remplies ne sont pas nulles. Ils les calculent de la même manière que dans les zones entièrement remplies, en se basant sur les travaux de Yacu et Martelli. Toutefois, il multiplie la dissipation visqueuse totale par un facteur de pondération χ_i . Ce dernier varie linéairement avec le taux de remplissage. Concernant le calcul du taux de cisaillement moyen $\dot{\gamma}$, l'auteur applique la relation définie par Yacu (1985) (Eq. 1-20). D'autre part, certains paramètres du modèle statique ont été identifiés en utilisant une méthode d'estimation à régression non-linéaire. Kulshrestha et al. (1991) estiment que l'ordre de grandeur des paramètres identifiés est correct. Les valeurs de certains paramètres notamment ceux du modèle rhéologique ont été comparées avec celles utilisées par Yacu (1985) dans son modèle de simulation. Toutefois, ils notent que la valeur du coefficient d'échange semble être importante ($U=10.41 \text{ KW.m}^{-2}$. °C).

Zone de convoyage solide :

Le bilan d'énergie en régime transitoire, pour un élément de volume de longueur *dz,* conduit à l'équation suivante :

$$f \cdot \frac{\partial T^{m}}{\partial t} = \frac{\chi \cdot C_{s} \cdot N^{2} \cdot \eta_{s}}{2 \cdot V_{c} \cdot \rho_{m} \cdot C_{p}} + \frac{f \cdot U \cdot c_{e} \cdot B}{2 \cdot V_{c} \cdot \rho_{m} \cdot C_{p}} (T^{f} - T^{m}) - B \cdot N \cdot f \cdot \frac{\partial T^{m}}{\partial z}$$
 Eq. 1-27

avec T^m la température matière, T^f la température fourreaux, η_s la viscosité de la matière dans la zone de convoyage solide, C_s la constante géométrique (zone solide), C_p la capacité calorifique, χ facteur de dissipation visqueuse, U coefficient d'échange de chaleur et c_e le périmètre du circuit bivis.

Zone de fusion (état fondu) :

Contrairement à la zone de convoyage solide, le débit net est le même tout le long de la zone de fusion. Ceci découle de l'hypothèse que la densité de la matière est constante et que la zone de fusion est entièrement remplie. Ainsi, le débit net dans chaque section de la zone de fusion est égal au débit de sortie dans la filière. Dans ce cas, le comportement dynamique de la zone de fusion, dont la longueur varie dans le temps, est régi par le comportement transitoire des échanges thermiques qui est donné par l'équation suivante :

$$\frac{\partial T^{m}}{\partial t} = \frac{C_{m} \cdot N^{2} \cdot \eta}{2 \cdot V_{c} \cdot C_{p}} + \frac{U \cdot c_{e} \cdot B}{2 \cdot V_{c} \cdot C_{p}} \cdot (T^{f} - T^{m}) - F_{d} \cdot \frac{B}{2 \cdot V_{c}} \frac{\partial T^{m}}{\partial z}$$
Eq. 1-28

avec C_m constante géométrique (zone de fusion.

D Evolution de la longueur l_m :

La différence entre le débit entrant et sortant signifie que la frontière l_m , entre la zone de convoyage solide et la zone de fusion, varie avec le temps. Les auteurs modélisent ce mouvement par une équation différentielle ordinaire (Eq. 1-29) à travers l'écriture du bilan matière au niveau de cette frontière. Pour un fluide incompressible on a :

$$\frac{2V_c\rho_m(1-f)}{B}\frac{dl_m}{dt} = F_s - F_d \Longrightarrow \frac{dl_m}{dt} = \frac{B(F_s - F_d)}{2V_c\rho_m(1-f)}$$
Eq. 1-29

Conditions aux limites :

Les conditions aux limites (pour t > 0) sont :

$$z = 0$$
; $P_z = 0$; $T_z = 0$; $F = F_0$; $f = f_0$; $M = M_0$ Eq. 1-30

$$z = l_s : P_z = 0$$
; $T_z = T_s$; $F = F_s$; $f = f_s$; $M = M_s$ Eq. 1-31

$$z = L : P_z = P_{fil}; T_z = T_f; F = F_{fil}; M = M_{fil}$$
 Eq. 1-32

$$o\hat{u} F_{fil} = \frac{K_{fll} P_{fil}}{\eta_{fll}}$$
 (*F_{fil} débit en sortie de filière et*
K_f constante géométrique de la filière) Eq. 1-33

M caractérise la teneur en eau de la matière. Son évolution est régie par un bilan matière écrit sous forme d'EDP. Pour plus de détails, je renvoie le lecteur à l'article de Kulshrestha et al. (1992).

Les auteurs ont ensuite étudié expérimentalement la réponse dynamique d'une extrudeuse bivis corotative (Baker-Perkins MPF-50) à des échelons de débit d'alimentation, de teneur en eau et de vitesse de rotation des vis. L'étude du comportement dynamique se fait à travers le suivi de la pression en filière et de l'énergie mécanique fournie au système. La Figure 1-26 illustre la réponse transitoire simulée et expérimentale du procédé à un échelon de vitesse des vis de 300 à 400 tr/min pour un débit d'alimentation de 45 kg/h et une teneur en eau de 30% w.b (wet based).

Le modèle ainsi développé arrive à suivre d'une manière correcte le comportement dynamique du procédé pour les différents échelons appliqués (débit d'alimentation, vitesse de rotation des vis et teneur en eau).



Figure 1-26 : Réponse simulée et expérimentale à un échelon de vitesse de vis (Kulshrestha et al. 1992)

Dans une autre étude et en se basant sur les articles de Kulshrestha et al, (1991, 1992), Li (2001) a élaboré un modèle global 1-D pour un procédé de cuisson en extrudeuse. L'auteur a développé son modèle à partir des bilans de matière et d'énergie et aboutit donc à un système d'EDP pour décrire le procédé. Contrairement à Kulshrestha et al. (1991, 1992), le modèle développé par Li (2001) peut prendre théoriquement en compte le cas multi-zones (plusieurs zones entièrement remplies et plusieurs zones partiellement remplies). En effet, l'auteur a ajouté des éléments restrictifs (palettes) dans le profil de vis afin de représenter ce cas de figure.

D'un autre côté, l'auteur signale que l'EDP (Eq. 1-25) du taux de remplissage proposé par Kulshrestha et al, (1992), n'est pas adaptée à une approche EDP où le taux de remplissage est relatif à un volume discret. L'auteur note que cet inconvénient risque de poser des difficultés lors de la résolution numérique. Ainsi, afin de contourner ce problème, Li (2001) propose d'écrire le bilan matière en utilisant le débit, qui est une variable continue, au lieu du taux de remplissage. Il aboutit alors à l'EDP suivante :

$$\frac{\partial F}{\partial t} = -BN\frac{\partial F}{\partial z}$$
 Eq. 1-34

Le bilan thermique ainsi que le bilan matière prenant en compte la teneur en eau, sont développés de la même manière que dans Kulshrestha et al. (1992). Toutefois, Li (2001) ajoute une étude géométrique sur les éléments restrictifs pour le calcul des dissipations visqueuses. Certains paramètres du modèle ont été identifiés en utilisant une méthode de régression non-linéaire.

L'auteur signale que le modèle développé permet de simuler et de prédire le comportement du procédé sous différentes conditions opératoires. Il présente une simulation en régime stationnaire montrant l'évolution de la température, du taux de remplissage et de la pression le long des vis. Cependant, aucune comparaison avec des données expérimentales n'a été présentée afin de valider le comportement dynamique du modèle proposé.

Enfin, on peut citer les travaux menés par Prat et al. (2004) sur la modélisation dynamique du transport solide-liquide dans une extrudeuse bivis corotative. La stratégie adoptée par les auteurs consiste à séparer l'extrudeuse en plusieurs zones fonctionnelles, auxquelles ils ont affecté un modèle spécifique. Ces modèles sont basés sur les bilans matière et prennent en compte les informations acquises expérimentalement afin d'intégrer la connaissance sur la géométrie, les éléments de vis et les propriétés physico-chimiques de la matière. Les auteurs considèrent que le procédé est isotherme du fait de la présence de l'eau le long de l'extrudeuse et de la faible influence de la température sur les propriétés de la matière.

Le modèle développé repose donc sur l'écriture du bilan matière dans les zones partiellement et entièrement remplies conduisant à un système d'EDP.

Zones partiellement remplies :

Les éléments du profil de vis qui sont partiellement remplis sont les éléments de transport sauf ceux qui sont situés en aval d'un élément restrictif (vis inverse ou bloc malaxeur). Les auteurs considèrent alors qu'il n'y a pas de phénomène de compression de la matière c'est-à-dire qu'il n'existe pas de variation dans la porosité du solide. Ils écrivent le bilan matière du solide, du liquide et des phases internes liquides en prenant en compte le flux liquide transféré de la phase liquide vers la porosité du solide. Le modèle comporte un paramètre ajustable « α » pour les éléments de transport des vis.

Zones entièrement remplies :

Les éléments entièrement remplis sont les vis à pas inverse et les blocs malaxeurs. Les auteurs signalent que des études expérimentales antérieures, réalisées sur un système solideliquide (Prat et al., 1999 ; Prat et al., 1997) montrent que les éléments de transport situés en aval des vis inverses ne sont qu'à moitié remplis. Ils supposent alors que pour un système solide-liquide, et par rapport aux conditions opératoires, la pression créée au niveau de la vis inverse n'influence pas le comportement de la matière dans cet élément. Cette hypothèse est très forte, du fait que même dans le cas où la pression est faible, le phénomène de recirculation existe toujours à cause de la présence de l'écoulement en sens opposé crée par la vis inverse. Ce phénomène de re-circulation va sûrement influencer le comportement de la matière. Les auteurs indiquent que les autres éléments pleins se situent après le filtre qui permet d'évacuer le liquide. Le phénomène de compression du solide a lieu à ce niveau.

De la même manière, les bilans matière solide et liquide sont écrits en prenant en compte les différents phénomènes physiques existants. Le modèle, à ce niveau, comporte un autre paramètre ajustable « β » pour les blocs malaxeurs. Ce dernier caractérise le rapport entre la vitesse du solide et celle du liquide et permet de calculer la rétention de la masse au sein de l'élément.

Les EDP représentant le modèle ont été discrétisées, et une méthode de type Runge-Kutta a été utilisée pour la résolution du modèle. Les réponses expérimentales et simulées pour un échelon positif de vitesse de vis suivi d'un échelon négatif sont présentées dans la Figure 1-27. Les auteurs signalent que leur modèle prédit moyennement le comportement du procédé en réponse à l'échelon de vitesse. Ils pensent que cela est dû essentiellement à la manière dont ils ont modélisé la vis inverse. En effet, le modèle développé ne considère pas l'influence de la rotation des vis sur les phénomènes mécaniques qui se produisent au niveau des vis inverse.



Figure 1-27 : Réponse simulée et expérimentale à un échelon de vitesse (Prat et al., 2004)

1.3.2.2.2 Modèles dynamiques empiriques

Une autre manière de modéliser un procédé pour le commander consiste à utiliser des modèles de représentation dits « boîte noire » qui décrivent l'évolution temporelle des paramètres tels que la température, la pression,...etc. Ces derniers fournissent des relations simples entre les grandeurs mesurées et les paramètres de fonctionnement. Le comportement dynamique du procédé est alors modélisé à travers des fonctions de transfert.

Cayot et al. (1995) ont étudié l'effet du changement des conditions opératoires sur la température et la pression de la matière au niveau de la filière, ainsi que la puissance mécanique consommée. Pour cela, ils font varier la vitesse de rotation des vis, le débit de la matière et la teneur en eau qui sont considérés comme des paramètres d'entrée du modèle. Les réponses transitoires observées indiquent que le modèle se comporte comme un système du premier ordre avec un retard pur. La fonction de transfert est alors présentée comme suit :

$$H(s) = \frac{Y(s)}{U(s)} = \frac{K \cdot exp(-t_d \cdot s)}{(1 + \tau \cdot s)}$$
Eq. 1-35

Où *s* est la variable de Laplace, Y(s) le signal de sortie, U(s) le signal d'entrée, *K* le gain statique, t_d le temps de retard, et τ la constante de temps du système (s).

Dans une autre étude, Choulak et al. (2001) ont utilisé ce principe pour modéliser le comportement dynamique de la pression en sortie de filière pour un procédé d'extrusion réactive. Les études expérimentales menées montrent que le procédé à un comportement d'un système du second ordre avec retard. Du fait que le procédé est fortement non-linéaire et très complexe, il n'était pas possible de représenter le procédé par une simple fonction de transfert. Il était donc nécessaire d'utiliser une approche multi-modèles afin de représenter le procédé sur une grande plage de variation du rapport monomère/initiateur. Ainsi, pour une vitesse de vis de 160 tr/min, un débit d'alimentation de 3kg/h et une température fourreau de 170°C, deux modèles sont nécessaires pour représenter le procédé sur une plage de variation du rapport monomère/ initiateur ($[M_0]/[I_0]$) variant entre 300 et 900 (Choulak et al., 2001) :

• Pour $[M_0]/[I_0]$ entre [300,600] :

$$\Delta P_{mes1}(s) / \Delta P_{theo}(s) = e^{-100s} / (a_1 s + 1)^2$$
 Eq. 1-36

• Pour $[M_0]/[I_0]$ entre [600,900] :

$$\Delta P_{mes2}(s) / \Delta P_{theo}(s) = e^{-100s} / (a_2 s + 1)^2$$
 Eq. 1-37

 ΔP_{theo} représente le gradient de pression calculé théoriquement par une relation algébrique et ΔP_{mes} le gradient de pression mesuré expérimentalement en sortie de filière.

Ce modèle peut être considéré comme étant semi-empirique car le calcul du gradient de pression théorique ΔP_{theo} dépend de paramètres physiques tels que la température matière, le rapport monomère/initiateur ($[M_0]/[I_0]$), de la viscosité,...etc. Les paramètres a_1 et a_2 ont été déterminés en utilisant l'algorithme d'optimisation Marquard-Levenberg. L'optimisation est basée sur la minimisation de l'erreur entre la sortie mesurée et la sortie expérimentale.

Bien que la modélisation d'un procédé par une fonction de transfert rende compte de façon satisfaisante de son comportement dynamique, elle ne le fait qu'autour d'un point de fonctionnement donné, et elle ne peut pas être utilisée pour d'autres points de fonctionnement. Il est donc nécessaire de disposer d'un jeu de plusieurs fonctions de transfert pour représenter complètement le comportement du système, d'où l'inconvénient majeur de cette approche de modélisation

1.4. <u>CONCLUSION :</u>

Dans ce chapitre et dans un premier temps, nous avons abordé l'ensemble des caractéristiques et des paramètres de l'extrusion bivis. Globalement, nous avons défini les fonctions d'une extrudeuse bivis et les éléments majeurs qui la composent. Une analyse des différents profils de vis existants et leurs caractéristiques géométriques a aussi été présentée.

Dans un second temps, nous avons présenté un ensemble de travaux menés sur la modélisation des systèmes d'extrusion bivis. Les différentes études présentées montrent l'intérêt croissant porté à la compréhension et la prédiction du comportement du procédé d'extrusion. A travers l'étude bibliographique, nous avons présenté les différentes approches utilisées pour la modélisation des extrudeuses bivis. Chacune de ces approches présente des avantages et des inconvénients. L'approche génie des procédés est souvent utilisée pour la modélisation des DTS en combinant différents réacteurs idéaux. Son principal avantage est sa simplicité. Toutefois, elle nécessite dans la majorité des cas deux voire trois paramètres ajustables. Les modèles développés par cette approche ne sont pas prédictifs car pour chaque point de fonctionnement il est nécessaire d'identifier les différents paramètres du modèle ainsi que l'association des réacteurs idéaux nécessaire pour décrire la DTS. L'approche de la mécanique des milieux continus donne de meilleurs résultats. Les modèles élaborés avec cette approche sont plus précis car leur développement prend en compte différents phénomènes physiques, mécaniques et thermiques. Son inconvénient est qu'elle est relativement difficile à mettre en œuvre et donne lieu à des modèles relativement complexes. L'autre approche que nous avons citée est l'approche mixte, celle-ci combine à la fois le principe de la mécanique des milieux continus et l'approche génie des procédés. Les modèles obtenus avec cette approche donnent des résultats satisfaisants. C'est une approche intéressante qu'il faut explorer afin d'élaborer des modèles plus performants en terme de prédiction. Toutefois, il faut noter que les différents modèles présentés utilisant ces trois approches sont des modèles qui décrivent le procédé en régime stationnaire. Les seuls modèles qui prennent en compte le comportement dynamique du procédé sont ceux développés dans l'hypothèse monodimensionnelle et qui conduisent à un système d'équations aux dérivées partielles
(EDP). Ces modèles permettent de prédire différents paramètres du procédé d'extrusion à savoir la température, la pression, le taux de remplissage,...etc. De plus, ils arrivent à prédire le comportement transitoire (dynamique) du procédé lorsqu'on applique une variation des conditions opératoires (vitesse, débit,...). Enfin, nous avons cité les modèles de type « boîte noire » qui sont des modèles dynamiques empiriques dont le domaine de validité est très réduit et nécessite plusieurs paramètres ajustables. Ces derniers sont essentiellement élaborés pour la commande du procédé autour d'un point de fonctionnement.

CHAPITRE 2 : MODELISATION DU PROCEDE D'EXTRUSION REACTIVE

2.1. INTRODUCTION :

Ce chapitre est consacré à la description des phénomènes fondamentaux mis en jeu dans une extrudeuse bivis et à la manière dont ils sont habituellement modélisés. Cela nous permettra de présenter par la suite la méthodologie que nous avons adoptée pour modéliser le comportement dynamique d'un procédé d'extrusion réactive. Globalement, notre démarche repose sur une approche mixte reliant deux aspects : mécanique des milieux continus et génie des procédés. La réaction de polymérisation de l'ɛ-caprolactone a été choisie pour illustrer la démarche de modélisation. Enfin, un exemple illustratif montrant les différentes étapes de construction du modèle d'un procédé d'extrusion réactive est présenté afin de synthétiser la méthodologie de modélisation qui repose sur l'utilisation d'un élément de base qu'est le réacteur parfaitement agité continu (RCPA).

2.2. STRATEGIE ADOPTEE :

Le chapitre 1 a été consacré à l'étude bibliographique des modèles développés jusqu'à présent pour représenter le procédé d'extrusion. Il ressort de cette étude bibliographique que les modèles stationnaires sont principalement décrits par des méthodes de mécaniques des fluides ou par des méthodes du génie des procédés à travers l'utilisation de la distribution des temps de séjour. Quant aux modèles dynamiques, ils sont essentiellement basés sur l'écriture des équations de bilans (masse et énergie) ou bien ce sont des modèles de type « boîte noire » caractérisant le procédé par une ou plusieurs fonctions de transfert.

Afin de bénéficier des avantages des méthodes présentées, nous avons adopté une approche couplant l'aspect mécanique des fluides et celui du génie des procédés. Dans un premier temps, une discrétisation spatiale de l'écoulement dans l'extrudeuse est réalisée en se basant sur la notion de RCPA. L'écoulement de la matière le long des vis est approché par une cascade de RCPA avec reflux. Chaque réacteur correspond physiquement à l'écoulement dans une petite tranche de l'extrudeuse. Le calcul des débits directs et de reflux repose sur la prise en compte de la géométrie des vis et sur un modèle simplifié à une dimension des écoulements (Booy, 1980). Des expériences de DTS ont été réalisées afin de valider cette partie du modèle. L'ensemble du modèle est validé expérimentalement par comparaison avec la simulation du comportement de l'extrudeuse face à des variations appliquées en entrée du procédé.

Dans un second temps, on associe à chaque réacteur un morceau de fourreau et un morceau de vis correspondant à sa longueur (Figure 2-1). Les bilans matière globaux, par espèces et les bilans d'énergie sont alors écrits pour chaque élément ainsi défini en incluant les différents couplages existants (écoulement, comportement thermique et avancement de la réaction). Le modèle développé permet alors de prédire le comportement dynamique et statique des différentes variables d'état évoluant au sein de l'extrudeuse (taux de remplissage, pression, température, taux de conversion,...).



Figure 2-1: Représentation de l'extrudeuse par une cascade de CSTR

La grande différence entre notre modèle et ceux classiquement développés sur la base d'une représentation des écoulements par agencement de réacteurs idéaux est qu'il est beaucoup plus prédictif. En effet, seul le nombre de réacteurs est à fixer. Les débits directs et de reflux sont calculés à l'aide d'un modèle d'écoulement 1D simplifié en prenant en compte la géométrie des vis.

Le modèle global est élaboré en considérant uniquement les écoulements à l'état fondu de la matière. Par ailleurs, d'autres hypothèses ont été posées, à savoir :

- Le repère est stationnaire : les vis sont fixes et le fourreau est mobile,
- Les chenaux sont déroulés pour se ramener à une configuration plane,
- L'écoulement dans le chenal est considéré comme une combinaison d'un écoulement de cisaillement entre plaques parallèles et d'un écoulement de poiseuille plan (écoulement à une dimension),

- Les forces de masse et d'inertie sont négligées,
- La densité de la matière et la capacité calorifique spécifique sont constantes,
- Les fuites négligées,
- Les échanges de chaleur sur l'axe des vis sont pris en compte,
- Le fluide est considéré non-newtonien (la viscosité est exprimée par une loi de Carreau), et les conditions d'écoulement sont fortement non-isothermes.

2.3. <u>ASPECT ECOULEMENT DU MODELE :</u>

Le modèle d'écoulement représente la base sur laquelle repose le développement du modèle global. En effet, les bilans d'énergie et de matière s'établissent sur chaque élément de discrétisation en se référant au modèle d'écoulement, ceci à travers les débits directs et de reflux circulant entre chaque réacteur (Figure 2-1), d'où l'importance de ce dernier sur le comportement du modèle global.

Le réacteur continu parfaitement agité (RCPA) avec reflux (Figure 2-2) représente l'élément de base de la discrétisation. A partir de cet l'élément, il est possible de représenter n'importe quel élément du profil de vis (pas direct, pas inverse, bloc malaxeur et filière). Il suffit de prendre en compte les constantes géométriques de chaque élément de vis lors du calcul des débits directs et de reflux.



Figure 2-2 : Réacteur parfaitement agité avec reflux (pas direct)

Le volume libre de chaque réacteur est obtenu à partir du calcul de la section libre occupée par la matière, et il est donné par :

$$V = (S_F - 2S_V)L$$
 Eq. 2-1

 S_F : section transversale libre du fourreau ; S_v : section transversale d'une vis ; L : longueur du morceau de vis.

2.3.1 <u>Expression des debits pour les elements de vis a pas direct et</u> <u>inverse</u>

Comme nous l'avons déjà souligné, le schéma d'écoulement le long de l'extrudeuse est approché par une cascade de RCPA avec reflux éventuel. Les caractéristiques de l'écoulement sont issues de la mécanique des fluides. Les débits circulant entre les différents réacteurs sont calculés en appliquant le modèle 1-D stationnaire simplifié développé par Booy (1980). Ce dernier néglige ce qui se passe au voisinage des filets et considère l'écoulement longitudinal d'un fluide newtonien. Le champ de vitesse se réduit à la composante w(z) (Voir Chapitre 1). Il superpose alors un débit de cisaillement Q_c et un débit de contre pression Q_p .

$$Q_{ch} = Q_c \pm Q_p \qquad \qquad \text{Eq. 2-2}$$

Dans le cas d'un pas direct, le mouvement relatif du fourreau est moteur et le gradient de pression peut être soit positif, soit négatif. Pour un pas inverse, le mouvement du fourreau ramène la matière vers l'amont et le gradient de pression doit être négatif, et même dépasser une certaine valeur critique, pour que le débit puisse s'écouler vers l'aval.

D'autre part, la complexité du profil du chenal rend le calcul analytique difficile. Le calcul peut être simplifié en considérant en première approximation un canal rectangulaire et en appliquant aux écoulements de tirage et de contre-pression des facteurs correctifs qui tiennent compte de la géométrie particulière du chenal (A_d et A_p). Ceux-ci sont fonction du rapport largeur du chenal/ profondeur (Booy,1980).

On modélise ensuite les vis à *n* filets par un ensemble de (2n-1) chenaux parallèles et indépendants. Le débit volumique total (m^3/s) est alors défini par :

$$Q_0 = Q_d - Q_r = (2n-1)Q_{ch}$$
 Eq. 2-3

De là, pour (2n-1) chenaux indépendants, on obtient :

$$Q_d = (2n-1) \cdot A_d \cdot W \cdot H \cdot \frac{V_{1z}}{2}$$
 Eq. 2-4

$$Q_r = (2n-1) \cdot A_p \cdot \frac{H^3 W}{12\eta} \cdot \frac{\Delta P}{\Delta z}$$
 Eq. 2-5

où W représente la largeur du chenal, H sa profondeur et η la viscosité de la matière.

Ces résultats supposent une viscosité constante. La viscosité variant énormément dans l'extrudeuse, nous les appliquerons localement.

 V_{1z} (*m/s*) caractérise la projection de la vitesse du fourreau selon la direction d'écoulement. Elle est donnée par :

$$V_{1z} = \frac{\pi \cdot N}{60} \cdot D_{ext} \cdot \cos\phi \qquad \text{Eq. 2-6}$$

avec ϕ l'angle de filet, N la vitesse de rotation des vis (*tr/min*) et D_{ext} le diamètre extérieur de la vis.

Les éléments de base représentant l'écoulement dans un morceau de vis à pas direct et inverse sont présentés dans la Figure 2-3.



Figure 2-3 : Structure des éléments de base pour un pas de vis direct et inverse

Ces réacteurs sont caractérisés par leur volume libre V_i et par les débits massiques :

- Les débits entrants (F_{i-1}, F_{i+1}) représentent les débits nets venant des réacteurs
 i-1 et *i*+1.
- Les débits F_i^d, F_i^r caractérisent respectivement le débit de cisaillement et le débit de reflux. Dans certaines configurations, un écoulement de Poiseuille F_i^p, issu du réacteur *i*, peut être nécessaire.

L'écoulement de Poiseuille F_i^p est introduit au niveau de la jonction entre une vis à pas direct et une vis à pas inverse. Dans cette zone, la géométrie est très complexe et la cinématique également (mouvement en directions opposées de chacune des vis) (Agassant et al., 1996). Cette zone est donc assimilée à un écoulement de Poiseuille simple associé à une perte de charge ΔP_{zi} , dans une géométrie de largueur réduite W_{zi} et de longueur L_{zi} :

$$F_i^{p} = \rho_m \frac{W_{zi} H^3}{12\eta} \frac{\Delta P_{zi}}{L_{zi}}$$
 Eq. 2-7

avec : $W_{zi} = W - e$ et $L_{zi} = 2 \psi R_{ext}$ (e : épaisseur du filet ; R_{ext} : rayon externe des vis ; ψ l'angle de la zone d'interpénétration des filets et ρ_m : la densité de la matière).



Figure 2-4 : Représentation de l'interconnexion d'un pas de vis direct et inverse

La présence de l'écoulement de Poiseuille au niveau de la jonction entre la vis à pas direct et la vis à pas inverse est nécessaire dans l'élaboration du modèle d'écoulement. En effet, nous avons réalisé des simulations avec et sans l'écoulement de poiseuille F_i^p et nous avons vérifié que la matière ne peut franchir la vis inverse qu'avec la présence de cet écoulement. Dans le cas contraire, nous avons observé que les réacteurs se trouvant en amont de la vis inverse se remplissaient jusqu'à atteindre le premier réacteur de la cascade alors que les réacteurs en aval de la vis inverse restaient pratiquement vide.

A travers la Figure 2-4, on voit que si « le réacteur i » est plein un gradient de pression ΔP se crée entre celui-ci et « le réacteur i-1 ». En conséquence, il est nécessaire d'introduire un écoulement de Poiseuille F_i^p pour prendre en compte l'effet du gradient de pression. De plus, cet écoulement permet d'assurer une continuité au niveau du modèle d'écoulement.

Physiquement cela rejoint le fait qu'une des particularités des extrudeuses bivis est qu'elles fonctionnent généralement en n'étant que partiellement remplies (Figure 2-5).



Figure 2-5 : Etat de la matière à l'intérieur d'une extrudeuse bivis (Agassant et al., 1996)

La Figure 2-5 représente les deux vis d'une extrudeuse corotative après arrêt et extraction du fourreau (Clextral BC 45). On observe que la succession des zones partiellement et totalement remplies est fonction de la géométrie des vis. Il en résulte que la zone d'alimentation, et plus généralement les zones de transport le long de la vis (hors éléments restrictifs), ne peuvent qu'être que faiblement remplies. Ce mode de fonctionnement permet un découplage plus ou moins important entre les deux paramètres de réglage de l'extrudeuse que sont la vitesse de rotation des vis N et le débit massique d'alimentation F_0 . La

modification conjointe de ces deux paramètres permet de jouer sur le taux de remplissage global de l'extrudeuse. En pratique, pour un profil de vis donné, le rapport F_0/N (Gao et al., 1999 ; Agassant et al., 1996) est souvent utilisé pour caractériser un taux de remplissage global de l'extrudeuse bivis. Toutefois, le taux de remplissage local « f_i » va être un nouveau paramètre important lors de la modélisation des écoulements, il est clair que les écoulements seront différents, suivant que le chenal de vis sera rempli à 50 ou 100%.

Dans une extrudeuse monovis, le fonctionnement optimum est obtenu pour un remplissage maximum de la vis. Le profil de pression a alors une allure relativement simple. Par contre, dans les extrudeuses bivis le profil de pression est beaucoup plus compliqué à obtenir. En effet, selon le profil de vis utilisé, il peut y avoir plusieurs zones partiellement ou entièrement remplies. Dans ce cas, c'est seulement au niveau des zones entièrement remplies qu'il y a établissement d'un profil de pression et d'écoulement de type Poiseuille associé. Ces zones de mise en pression du polymère sont situées avant la filière et dans les zones en amont des vis inverses ou de malaxeurs (Figure 2-5). Dans les zones partiellement remplies la pression est égale à la pression atmosphérique P_0 , ce qui implique que les écoulements de contre-pression sont nuls. L'écoulement dans les zones partiellement remplies se résume donc à un écoulement de cisaillement F_i^d et d'un écoulement de Poiseuille F_i^r .

2.3.1.1 Bilans de masse (calcul du profil de remplissage de l'extrudeuse)

Pour modéliser l'évolution temporelle du remplissage au sein de l'extrudeuse, nous avons défini un taux de remplissage au niveau de chaque réacteur de la cascade. Ce taux représente le rapport du volume occupé par la matière sur le volume libre du réacteur. Ainsi, pour un réacteur *i* entièrement rempli le taux de remplissage f_i est égal à 1. Dans ce cas, on a une continuité des débits (débits entrants = débits sortants) et l'équation différentielle caractérisant le bilan matière global devient une simple équation algébrique.

A titre d'illustration, le bilan matière global du réacteur *i* représentant une section de vis à pas direct est donné par :

$$\begin{cases} \rho_{m} \cdot V_{i} \cdot \frac{df_{i}}{dt} = F_{i-1} + F_{i+1} - F_{i}^{d} - F_{i}^{r} - F_{i}^{p} & Si \ f_{i} < 1 \\ 0 = F_{i-1} + F_{i+1} - F_{i}^{d} - F_{i}^{r} - F_{i}^{p} & Si \ f_{i} = 1 \end{cases}$$
Eq. 2-8

Le calcul des débits directs et de reflux est basé sur la méthode développée par Booy (1980). Les expressions des différents débits dépendent de la configuration géométrique des vis. Elles sont résumées dans le Tableau 2-1:

Réacteur i	Débit direct F_i^d	Débit de reflux (F_i^r et F_i^p)
Pas de vis direct	$ \rho_m \cdot K_i^d \cdot N \cdot f_i \cdot V_i $	$\frac{K_i^r}{\eta_i \left(T_i^m, \varphi_i\right)} \cdot (P_i - P_{i-1})$
		$\frac{K_i^r}{\eta_i \left(T_i^m, \varphi_i\right)} \cdot (P_i - P_{i+1})$
Pas de vis inverse	$ ho_m \cdot K_i^d \cdot N \cdot f_i \cdot V_i$	$\frac{K_i^p}{\eta_i \left(T_i^m, \varphi_i\right)} \cdot (P_i - P_{i-1})$
		(jonction vis directe-inverse)

Tableau 2-1: Expressions des débits directs et de reflux

Les constantes K_i^d et K_i^r sont fonction de la géométrie de la vis et de la longueur du morceau de vis correspondant. Les paramètres η_i , T_i^m et φ_i représentent respectivement la viscosité, la température de la matière et la fraction volumique du polymère. Le calcul de ces paramètres sera détaillé dans les sections suivantes.

2.3.2 LES MALAXEURS :

Les malaxeurs ou les éléments de mélange figurent parmi les principaux types d'éléments couramment utilisés lors de la composition d'un profil d'extrudeuse bivis. Ils sont

destinés à favoriser le mélange ou la dispersion (Figure 2-6). Les éléments malaxeurs dits bilobes ou trilobes sont les plus utilisés pour l'extrusion des thermoplastiques.

Comme nous l'avons vu dans le chapitre 1, ces éléments sont dépourvus d'hélicité et présentent la même section que celle des vis dans un plan perpendiculaire à l'axe des vis. Les paramètres nécessaires à leur description sont alors leur épaisseur E et l'angle de décalage α_d des uns par rapport aux autres. Ce décalage est dit direct ($0 < \alpha_d < 90^\circ$) si les sommets créent un pseudo-chenal analogue à celui d'un élément de vis à pas direct. Dans le cas contraire, on parlera de décalage inverse ($180^\circ > \alpha_d > 90^\circ$).



Figure 2-6 : Zone d'élément malaxeurs dits bilobes (vis à deux sommets) (Agassant et al., 1996)

Les approches employées pour la modélisation des éléments malaxeurs sont du type de celles décrites pour les éléments de vis à pas direct où inverse, à savoir des écoulements 1-D dans les géométries déroulées Werner (1976) et des écoulements 2D ou 3D dans les géométries réelles (Noé, 1992 ; Vergnes et Noé 1992).

Dans notre cas, les blocs malaxeurs avec un angle de décalage positif ou négatif ont été assimilés à un élément de vis à pas direct ou inverse de pas équivalent $\frac{2\pi E}{\alpha_d}$ (Potente et al., 1990) dans lequel l'écoulement principal est considéré comme étant la superposition d'un débit de cisaillement et de pression corrigés par des facteurs de forme. Dans ces conditions, un seul réacteur parfaitement agité est nécessaire pour décrire les écoulements au sein d'un bloc malaxeur. Le bilan matière (Eq. 2-8) établi pour les éléments à pas direct et inverse peut alors être appliqué pour les blocs malaxeur avec un décalage positif ou négatif.

2.3.3 LA FILIERE

Dans le but de simplifier la modélisation des écoulements au sein de la filière, cette dernière est approchée par un écoulement de Poiseuille dans un tube de rayon et de longueur donnés. Le débit au niveau de la filière est alors donné par la relation suivante :

$$F_f^p = \frac{K_f^p}{\eta_{fil}} \Delta P$$
 Eq. 2-9

 K_f^p : constante qui caractérise la géométrie de la filière ; η_{fil} : viscosité de la matière en filière. Elle se calcule de la même manière que la viscosité le long de l'extrudeuse (Eq. 2-25 et Eq. 2-26) la seule différence réside dans le calcul du taux de cisaillement.



Figure 2-7 : Ecoulement Poiseuille dans un tube

Pour l'écoulement d'un fluide newtonien dans un tube de longueur L et de rayon R (Figure 2-7), K_f^p est donné par :

$$K_{f}^{p} = \frac{\pi}{8} \frac{R^{4}}{L}$$
 Eq. 2-10

La filière se situe à l'extrémité de l'extrudeuse, cette dernière est représentée au niveau du dernier RCPA de la cascade par un écoulement de Poiseuille (Figure 2-8). Le bilan matière du dernier réacteur est alors donné par :

$$\begin{cases} \rho_{m} \cdot V_{n} \cdot \frac{df_{n}}{dt} = F_{n-1} - F_{f}^{p} - F_{n}^{r} & Si \ f_{i} < 1 \\ 0 = F_{n-1} - F_{f}^{p} - F_{n}^{r} & Si \ f_{i} = 1 \end{cases}$$
Eq. 2-11



Figure 2-8 : Représentation de la filière

D'après le bilan matière du dernier réacteur, le débit en sortie de filière F_f^p n'existe que si le dernier réacteur est entièrement rempli. En effet, représenter la filière par un écoulement de Poiseuille implique que le débit F_f^p est fonction du gradient de pression ΔP . Dans ce cas, le seul moyen de vider la filière est d'imposer un débit d'alimentation nul.

2.3.4 <u>CALCUL DU PROFIL DE PRESSION :</u>

La Figure 2-5 montre que selon le profil de vis utilisé, l'extrudeuse peut être composée de plusieurs zones partiellement et entièrement remplies. Toutefois, la modélisation d'un tel phénomène pose quelques problèmes notamment la détermination de la longueur de la zone entièrement remplie, la gestion, dans le cas d'un modèle dynamique à base d'EDP, de la frontière entre une zone partiellement et entièrement remplie (Kulshreshtha et al., 1992),...etc. En effet, au niveau des zones entièrement remplies nous avons une augmentation de pression qui se crée. Celle-ci va entraîner une création des débits de reflux. Le calcul de ces débits nécessite la connaissance de la pression et de la longueur de la zone entièrement remplie (Eq. 2-5).

Nous avons traité ces différents problèmes d'une manière relativement simple. En effet, l'extrudeuse a été divisée en plusieurs sections auxquelles nous avons attribué un réacteur continu parfaitement agité avec reflux (Figure 2-9). A chaque réacteur correspond un volume libre (Eq. 2-1) donc une longueur axiale bien définie.



Figure 2-9 : Discrétisation de l'extrudeuse par une cascade de RCPA

Ainsi, si un réacteur devient plein, la longueur de la zone entièrement remplie correspondra à la longueur axiale de ce réacteur (Figure 2-10). La pression sera calculée par rapport à cette longueur et par rapport aux pressions en aval et en amont de ce réacteur.



Figure 2-10 : Schéma explicatif sur le calcul de la longueur des zones pleines

L'inconvénient de cette approche sera l'apparition de saut dans le calcul de pression. Cependant, cet inconvénient peut être réduit par une discrétisation très fines en termes de nombres de RCPA en amont d'une zone de restriction. Par ce moyen l'évolution de la pression aura un comportement plus proche du comportement réel.

Globalement, le calcul de la pression au niveau de chaque réacteur, et quel que soit l'élément de vis (pas direct ou inverse), se fait de la manière suivante :



✓ Si le taux de remplissage du réacteur *i* est inférieur à 1, alors la pression du réacteur est égale à la pression atmosphérique, en conséquence les débits de reflux sont nuls

$$P_i = P_0 \implies F_i^r = 0$$
 Eq. 2-12

✓ Si le taux de remplissage du réacteur *i* est égal à un (réacteur plein), la pression du réacteur est supérieure à la pression atmosphérique ce qui implique une création des débits de reflux.

$$P_i > P_0 \implies F_i^r \neq 0$$
 Eq. 2-13

Dans ce cas, nous avons une continuité des débits au niveau du réacteur *i*, c'est à dire que la somme des débits entrants dans le réacteur *i* est égale à la somme des débits sortants.

continuité des débits
$$\Rightarrow$$
 $F^{i-1} + F^{i+1} = F_i^d + F_i^r$ Eq. 2-14

En développant les expressions des différents débits de l'équation (Eq. 2-14) pour tous les réacteurs tels que $f_i = 1$, on obtient un système d'équations algébriques linéaires sous la forme « $A \cdot P = B$ ». Pour calculer les pressions au niveau de chaque réacteur, il suffit de résoudre le système :

$$A \cdot P = B \implies P = A^{-1} \cdot B$$
 Eq. 2-15

La matrice A contient dans la diagonale la valeur 1 pour les zones partiellement remplies et généralement elle a une structure tri-diagonale dans les zones pleines. La démonstration qui montre que la matrice A est inversible est présentée en annexe 2. Le calcul algébrique du profil de pression est bien sûr réalisé à chaque instant en fonction du profil de remplissage obtenu par la résolution des bilans de masse tels que donnés par les équations Eq. 2-8 et Eq. 2-11.

2.4. ASPECT REACTIF DU MODELE

2.4.1 INTRODUCTION

La réaction modèle choisie pour illustrer la démarche de modélisation est la réaction de polymérisation de l'ɛ-caprolactone. Le choix s'est porté sur cette réaction car toutes les données rhéocinétiques étaient disponibles dans les travaux de recherches de Gimenez et al. (2000a). La polymérisation de l'ɛ-caprolactone est amorcée par un organométallique, le tétrapropylorthotitanate (TiP).

En se basant sur l'étude de Gimenez concernant le comportement cinétique et rhéologique de la polymérisation de l' ε -caprolactone, nous avons développé un modèle de réaction, couplé avec le modèle d'écoulement et le modèle thermique afin de décrire l'évolution au cours du temps et le long de l'extrudeuse de la viscosité, de la composition et de la masse molaire moyenne en masse « \overline{M}_w » du polymère.

2.4.2 MECANISME REACTIONNEL DE LA REACTION CHIMIQUE

La polymérisation de l'ɛ-caprolactone est une polymérisation vivante dont le mécanisme est de type « coordination-insertion » avec rupture sélective du cycle lactone au niveau de la liaison acyle-oxygène (Figure 2-11). La chaîne polycaprolactone croît à partir de l'atome métallique (titane), par insertion successive d'unités monomères. Cette polymérisation en chaîne est de type vivante tant que les sites réactifs ne sont pas détruits.



Figure 2-11 : Mécanisme réactionnel de la polymérisation de l'ɛ-caprolactone (Gimenez, 1999)

Il peut exister plusieurs organométalliques pour amorcer la réaction de polymérisation de l'ɛ-caprolactone. Généralement, le choix de l'amorceur dépend de son aptitude à donner le moins de réactions de transestérification intra ou intermoléculaires. Toutefois, dans l'optique de réaliser la polymérisation en extrudeuse, il est nécessaire de trouver un compromis entre la rapidité de réaction et la minimisation des réactions secondaires. En effet, un bon contrôle de la polymérisation préconise des températures basses afin de limiter les réactions de transestérification. Dans ce cas, les cinétiques correspondantes sont très lentes (à l'échelle de l'heure). Cependant, ces conditions expérimentales classiques ne sont pas compatibles avec un procédé de polymérisation en extrudeuse, à savoir des températures de réactions élevées pour travailler en masse et avoir des cinétiques de réaction rapides à l'échelle de la minute.

Dans l'étude menée par Gimenez (1999) sur le choix de l'amorceur, l'auteur a testé différents types d'amorceur afin de déterminer l'amorceur le mieux adapté d'un point de vue cinétique pouvant permettre la polymérisation en extrudeuse. D'après la Figure 2-12, l'auteur observe qu'à 140°C la cinétique de réaction amorcée par le tétrapropylorthotitanate est plus rapide. Ainsi, parmi les différents amorceurs testés, le TiP semble le mieux adapté car les temps de polymérisation peuvent être très courts et donc compatibles avec les temps de séjours dans l'extrudeuse. C'est pour toutes ces raisons que Gimenez a choisi d'utiliser cet initiateur afin d'étudier expérimentalement la polymérisation de l'ɛ-caprolactone en extrudeuse bivis corotative.



Figure 2-12: Cinétiques de polymérisation pour différents amorceurs (Gimenez, 1999)

2.4.3 <u>VITESSE DE LA REACTION : ETUDE CINETIQUE EN REACTEUR FERME</u> PARFAITEMENT AGITE ISOTHERME

Le développement du modèle de l'extrudeuse nécessite la connaissance des données cinétiques et rhéologiques afin de pouvoir suivre l'évolution de la composition du milieu en fonction du temps et le long de l'extrudeuse. Cela permet de prendre en compte les différents couplages et interactions pouvant exister entre la réaction chimique, l'écoulement au sein de l'extrudeuse et les échanges thermiques.

Les différentes études cinétiques réalisées sur la polymérisation de l'ɛ-caprolactone, pour certains amorceurs de type alcoolate-métallique, ont montré que l'ordre apparent par rapport au monomère est égal à un et ce que ce soit en solution (Dubois et al., 1991) ou en masse (Kricheldorf et al., 1991).

Les lois cinétiques utilisées par Gimenez et al. (2000a) lors de son étude de la réaction de polymérisation de l'ɛ-caprolactone, en extrudeuse bivis corotative, ont été développées en réacteur fermé (entre les plateaux d'un rhéomètre). Ainsi, le bilan matière en monomère dans un réacteur fermé est donné par :

$$\frac{d[M]}{dt} = -r$$
 Eq. 2-16

où r est la vitesse de la réaction et [M] la concentration en monomère.

La loi cinétique globale caractérisant la vitesse de réaction est donnée par :

$$r = K_{app} \cdot [M]$$
 Eq. 2-17

 K_{app} représente la constante de vitesse apparente exprimée en fonction de la température et de la concentration initiale en amorceur $[I_0]$. La concentration en amorceur est définie par le rapport $[M_0]/[I_0]$ (rapport de la concentration initiale en monomère sur la concentration initiale en amorceur).

La constante de vitesse peut être décrite par l'équation suivante :

$$K_{app} = 1.2 \cdot 10^{16} \cdot [I_0]^{\alpha_c} \cdot exp(-E_a/RT) \text{ s}^{-1}$$
 Eq. 2-18

avec *R* la constante des gaz parfaits, E_a l'énergie d'activation et α_c l'ordre apparent par rapport à l'amorceur.

L'intégration du bilan (Eq. 2-16) conduit à l'expression suivante du taux de conversion exprimé en %:

$$X_{RF}(t) = 100 \times (1 - exp(-K_{app} \cdot t))$$
 Eq. 2-19

Par définition du taux de conversion $X_{RF}(t)$ en réacteur fermé uniforme (Villermaux, 1995), on a la relation suivante :

$$M(t) = [M_0](1 - X_{RF}(t))$$
 Eq. 2-20

Gimenez a ensuite validé le modèle cinétique sur deux séries expériences. Dans la première série, il fait varier le rapport $[M_0]/[I_0]$ en gardant la température fixe à 140°C (Figure 2-13) et dans la seconde il fait varier la température en fixant le rapport $[M_0]/[I_0]$ à 800 (Figure 2-14).

L'auteur observe à travers ces deux séries d'expériences l'influence de la température et du rapport $[M_0]/[I_0]$ sur la cinétique de réaction. Il constate que l'augmentation du rapport $[M_0]/[I_0]$ entraîne une cinétique beaucoup plus lente. Par contre, la cinétique devient plus rapide à forte température. Le modèle cinétique développé décrit correctement les variations du taux de conversion dans les deux séries expériences.



Figure 2-13: Influence du rapport $[M_0]/[I_0]$ sur la cinétique de réaction

Figure 2-14:Influence de la température sur la cinétique de réaction

Un autre paramètre pouvant avoir une influence significative sur l'évolution de la réaction concerne l'ordre apparent par rapport à l'amorceur (α_c) (voir Eq. 2-18). Les études cinétiques réalisées sur la polymérisation de l' ε -caprolactone par Gimenez (1999) montrent que l'ordre partiel par rapport à l'amorceur est supérieur à un. Il a observé que le nombre de sites actifs est dépendant de la concentration en amorceur et que le TiP n'est pas miscible avec la caprolactone et forme une émulsion. Toutefois, dans d'autres études cinétiques menées sur la polymérisation de l' ε -caprolactone, l'ordre partiel par rapport à l'amorceur est généralement observé égal à un (Kricheldorf et al., 1991, Dubois et al., 1991). Ceci signifie que le rapport $K_{app}/[I_0]$ est constant à une température donné et que la concentration en sites actifs est indépendante de la concentration en amorceur.

Poulesquen (2001) a utilisé les lois cinétiques et rhéologiques développées par Gimenez (1999) afin de modéliser la réaction de polymérisation de l' ε -caprolactone en extrudeuse bivis corotative. Toutefois, l'auteur a entrepris des essais rhéologiques complémentaires afin de s'assurer de la validité des constantes cinétiques déterminées par Gimenez. Les résultats de ces essais ont montré que certaines constantes sont fonctions de la température et différentes de 10% par rapport à celles déterminées par Gimenez (1999). Dans son étude, Poulesquen (2001) a pu confirmer que l'ordre apparent par rapport à l'amorceur (α_c) est fonction de la température. D'autre part, une modification minime de ce paramètre (α_c) peut entraîner de fortes différences au niveau du taux de conversion (Figure 2-15).

Cependant, l'auteur n'a pas poursuivi plus en avant l'étude rhéocinétique malgré le fait qu'il a constaté que l'ordre apparent par rapport à l'amorceur (α_c) dépend de la

température et qu'il influence d'une manière très significative la cinétique de réaction. Il a néanmoins déterminé la valeur de α_c à basse température afin de valider les résultats expérimentaux. Il a donc pris la valeur de α_c =2.74 pour tenter de rendre compte des taux de conversion mesurés à basse température (T=105°C et 125°C). D'autre part, Gimenez (1999) a trouvé que cette valeur est égale à 3.25 (α_c =3.25) pour une température de 140°C et qu'elle est égale à 3 pour une température de 100°C (α_c =3). De là, Gimenez a constaté qu'effectivement l'ordre apparent par rapport à l'amorceur dépend de la température, par conséquent il peut affecter les résultats de simulation du taux de conversion.



Figure 2-15: Influence de l'ordre apparent par rapport à l'amorceur sur la cinétique (Poulesquen, 2001)

Lors de l'élaboration du modèle, nous avons fixé α_c à 2.74 pour des températures matière comprises entre 100 et 130 °C et à 3.25 pour des températures supérieures à 130°C.

En ce qui concerne le calcul de l'évolution de la masse molaire moyenne en masse M_w en fonction du taux de conversion donc de la concentration monomère, Gimenez (1999) a conclu que sur le domaine expérimental des rapports $[M_0]/[I_0]$ étudié pour la polymérisation de l' ε -caprolactone (100< $[M_0]/[I_0]$ <1600), la masse molaire moyenne en masse varie linéairement avec l'avancement de la réaction. Ainsi, M_w peut être calculée à partir de l'équation linéaire globale suivante fonction de la concentration en monomère :

$$M_{w} = K_{c} \cdot X_{RF}(t) + m^{\varepsilon} \qquad (g/mole) \qquad \qquad \text{Eq. 2-21}$$

où $m^{\varepsilon} = 114$ g/mole est la masse molaire du monomère.

 K_c dépend du rapport $[M_0]/[I_0]$ et varie linéairement avec celui-ci. K_c est indépendant de la température de polymérisation pour (100°C<T<160°C) et il est donné par :

$$K_c = 0.39 \times [M_0] / [I_0] + 79$$
 (g/mole) Eq. 2-22

2.4.4 <u>Rheologie du milieu reactif :</u>

Le développement d'un modèle de rhéologie évolutive capable de prédire les variations des propriétés d'un système réactif au cours d'une polymérisation est très important si on veut modéliser ou contrôler un procédé tel que la polymérisation en masse de l'ɛcaprolactone en extrudeuse. Le principe de la modélisation est basé sur la connaissance de deux points importants :

- > Le modèle cinétique de la réaction de polymérisation donnant la vitesse de réaction.
- Le modèle rhéologique décrivant les propriétés viscoélastiques du polymère formé par le procédé en fonction de la composition et de la température.

En utilisant les lois cinétiques présentées dans la section précédente, il est possible de prédire les variations des propriétés viscoélastiques durant la polymérisation de l'æcaprolactone (Gimenez et al., 2000a et b). Un modèle rhéologique prédictive peut être obtenu en combinant ces lois cinétiques avec un modèle décrivant le comportement rhéologique de la polycaprolactone fondue, corrigé de l'effet de dilution. En effet, dans le cas d'une polymérisation en chaîne, le mélange réactif au cours de la polymérisation peut être considéré comme une solution de polymère dissout dans son monomère puisque le monomère est consommé progressivement jusqu'à une conversion totale.

Dans notre cas, nous avons utilisé le modèle de Yasuda-Carreau pour la prédiction de la viscosité du polymère fondu $\eta(\dot{\gamma})$. Ce dernier a été intégré au niveau du modèle global afin de prendre en compte les effets de la viscosité sur le comportement du procédé d'extrusion. En effet, dans le cas des réactions de polymérisation, la viscosité subit une augmentation très importante avec l'avancement de la réaction (la viscosité passant par exemple d'une valeur

proche de celle de l'eau $(10^{-3} Pa.s)$ à celle d'un polymère de masse moléculaire importante $(10^{3} Pa.s)$. Cette importante variation affecte directement le comportement de l'écoulement et le comportement thermique du procédé d'extrusion et donc l'avancement de la réaction (qui dépend de la température) à travers la dissipation visqueuse. D'où la nécessité de prendre en compte ce phénomène au niveau du modèle global.

Dans le cas de la polymérisation de l'ɛ-caprolactone, la concentration en polymère et la masse molaire varient simultanément. La solution de polymère va suivre successivement au cours de la polymérisation un comportement rhéologique de Rouse puis enchevêtré. Dans le régime de Rouse, nous avons un comportement newtonien, c'est à dire que la viscosité ne dépend pas du taux de cisaillement, alors que dans le régime enchevêtré, les lois donnant l'évolution de la viscosité sont des lois de type Carreau-Yasuda.

Comme nous l'avons souligné, au cours de la polymérisation, le polymère formé est en solution dans son propre monomère. La masse molaire critique d'un polymère en solution $(M_c)_{solution}$, et par conséquent la masse molaire entre enchevêtrement, dépend de la fraction volumique φ du polymère (Gimenez et al., 2000a) :

$$(M_c)_{solution} = 2 \cdot (M)_e = (M_c)_{brut} \cdot \varphi^{-1.25}$$
 (g/mole) Eq. 2-23

 M_e est la masse molaire entre enchevêtrement, elle est égale à 3000 g/mole et φ est la fraction volumique du polymère donnée par la relation suivante :

$$\varphi = \frac{Volume \ du \ polymère}{Volume \ total}$$
 Eq. 2-24

Dans le cas de la polymérisation de l'ɛ-caprolactone, le mélange réactif au départ est très liquide et au fur et à mesure que le mélange réagit, le matériau devient très visqueux. On passe d'un régime d'écoulement de type Rouse en dessous d'une masse critique à un régime de type enchevêtré au dessus. Le calcul de la viscosité se fait alors comme suit :

> Lorsque $M_w < (M_c)_{Brut} \cdot \varphi^{-1.25}$, l'équation du régime de Rouse s'applique et la viscosité s'écrit :

$$\eta = 2.24 \cdot 10^{-5} \cdot a_T \cdot \left(M_w\right)^{1.2} \cdot a_\varphi \cdot \varphi \quad \text{en Pa.s} \qquad \text{Eq. 2-25}$$

avec a_T facteur de glissement et a_{φ} correction du volume libre.

> Lorsque $M_w > (M_c)_{Brut} \cdot \varphi^{-1.25}$, on considère le régime enchevêtré. La viscosité complexe suit alors une loi de Yasuda- Carreau :

$$\eta = \eta_0 \left[1 + \left(\lambda \dot{\gamma} \right)^a \right]^{n-1/a} \quad \text{en Pa.s} \qquad \text{Eq. 2-26}$$

 λ représente la transition entre le comportement newtonien et le comportement pseudoplastique (diminution de la viscosité avec la vitesse de cisaillement). Il est également caractéristique du temps de relaxation (reptation) des chaînes caprolactone. n = 0.52 est l'indice de pseudo plasticité, a = 1.05 caractérise la largeur de la transition entre les deux comportements, η_0 la viscosité au plateau newtonien et enfin $\dot{\gamma}$ est le taux de cisaillement.

 η_0 et λ sont tous deux exprimés en fonction de la température, de la masse molaire en masse et de la concentration du polymère dans son monomère selon les relations suivantes :

$$\eta_0 = A \cdot exp\left[\frac{E_v}{R}\left(\frac{1}{T^m} - \frac{1}{T_0}\right)\right] \cdot (M_w)^{\alpha_v} \cdot a_{\varphi} \cdot \varphi^4 \quad \text{ en Pa.s} \qquad \text{Eq. 2-27}$$

$$\lambda = B \cdot \left[\frac{E_{\nu}}{R} \left(\frac{1}{T^m} - \frac{1}{T_0} \right) \right] \cdot \left(M_{\nu} \right)^{\alpha_t} \cdot a_{\varphi} \cdot \varphi_i^{1.75}$$
 Eq. 2-28

avec T^m la température matière et R la constante des gaz parfaits. Par ailleurs, les valeurs des différentes constantes ont été déterminées par Gimenez (1999) : A = 1.35 10^{-17} , $E_v = 40 \text{ KJ/mole}$, $\alpha_v = 4.4$, $B = 1.7 \ 10^{-20}$, $\alpha_t = 4.4$, $T_0 = 140^{\circ}$ C. En ce qui concerne le paramètre a_{φ} caractérisant la correction du volume libre, Gimenez et al. (2000b) ont conclu que ce dernier est directement déterminé à partir des énergies d'activation de l'écoulement. a_{φ} est alors donné par l'expression suivante :

$$a_{\varphi} = exp\left[-\left(\frac{1}{f_b} - \frac{1}{f_s}\right)\right] = exp\left[-\frac{1}{RT^m}(E_b - E_s)\right]$$
 Eq. 2-29

avec f_s et f_b les volumes libres correspondant respectivement au polymère brut et à la solution de polymère. E_s et E_b sont les énergies d'activation correspondantes.

En admettant la loi d'additivité des volumes libres, nous avons la loi suivante pour les énergies d'activation à l'écoulement :

$$\frac{1}{E_s} = \frac{\varphi}{E_b} + \frac{1-\varphi}{E_m}$$
 Eq. 2-30

L'énergie d'activation du monomère est $E_m = 29 \ KJ/mole$ et celle du polymère pur est $E_s = 40 \ KJ/mole$. Ainsi, la correction du volume libre a_{φ} peut être facilement déterminée pour chaque concentration de polymère φ à partir des équations Eq. 2-29 et Eq. 2-30. En ce qui concerne le facteur de glissement a_T , ce dernier est donné par la relation suivante :

$$a_T = \exp\left[\left(\frac{E_v}{R}\right) \cdot \left(\frac{1}{T^m} - \frac{1}{T_0}\right)\right]$$
 Eq. 2-31

où T_0 est une température de référence égale à 140 °C.

2.4.5 BILANS MATIERE :



Figure 2-16 : Cascade de RCPA représentant une partie de l'extrudeuse

Lors de la polymérisation de l' ε -caprolactone une seule réaction est supposée se produire. L'amorceur n'est ni produit ni consommé, il sert seulement de « base » aux chaînes vivantes. Les bilans matière en monomère et amorceur sont établis en faisant l'hypothèse que la densité du milieu est constante. Les bilans matières en masse du monomère et de l'amorceur, au niveau du réacteur *i*, sont établis selon la Figure 2-16 par les équations Eq. 2-32 et Eq. 2-33 :

$$m^{\varepsilon} \cdot \frac{dn_{i}^{\varepsilon}}{dt} = \left(\varpi_{i-1}^{\varepsilon}F_{i-1} + \varpi_{i+1}^{\varepsilon}F_{i+1}\right) - \varpi_{i}^{\varepsilon} \cdot \left(F_{i}^{d} + F_{i}^{r}\right) - m^{\varepsilon} \cdot r_{i} \cdot \mathbf{V}_{i} \cdot f_{i} \qquad \text{Eq. 2-32}$$

$$m^{I} \cdot \frac{dn_{i}^{I}}{dt} = \left(\boldsymbol{\varpi}_{i-1}^{I} F_{i-1} + \boldsymbol{\varpi}_{i+1}^{I} F_{i+1} \right) - \boldsymbol{\varpi}_{i}^{I} \cdot \left(F_{i}^{d} + F_{i}^{r} \right)$$
Eq. 2-33

 (m^{I}, n^{I}) et $(m^{\varepsilon}, n^{\varepsilon})$ sont respectivement la masse molaire et le nombre de moles de l'amorceur et du monomère et T_{i}^{m} , la température matière dans le réacteur *i*.

Pour rappel, la vitesse de réaction r_i au niveau du réacteur i est donnée par :

$$r_i = 1.2 \cdot 10^{16} \cdot \left(\frac{n_i^I}{\rho_m V_i f_i}\right)^{\alpha_c} \cdot \exp\left(-\frac{E_a}{RT_i^m}\right) \cdot \left(\frac{n_i^\varepsilon}{V_i f_i}\right)$$
 Eq. 2-34

Dans les équations Eq. 2-32 et Eq. 2-33 (F_i^r, F_i^d) et (F_{i-1}, F_{i+1}) représentent les débits globaux entrant et sortant au niveau du réacteur *i*. Cependant, il est nécessaire de calculer les fractions massiques relatives au monomère et à l'amorceur afin d'évaluer les débits correspondants à chaque espèce circulant dans le réacteur *i*. Ainsi, les fractions massiques du monomère et de l'amorceur dans le réacteur *i* sont respectivement données par :

$$\boldsymbol{\varpi}_{i}^{\varepsilon} = \frac{\boldsymbol{m}^{\varepsilon}\boldsymbol{n}_{i}^{\varepsilon}}{\boldsymbol{\rho}_{m}\boldsymbol{V}_{i}\boldsymbol{f}_{i}}, \quad \boldsymbol{\varpi}_{i}^{I} = \frac{\boldsymbol{m}^{I}\boldsymbol{n}_{i}^{I}}{\boldsymbol{\rho}_{m}\boldsymbol{V}_{i}\boldsymbol{f}_{i}}$$
 Eq. 2-35

Au niveau du premier réacteur, le développement des bilans matières en monomère et en amorceur nécessitent la connaissance des débits d'alimentation de chaque espèce. Le calcul de ces débits se fait selon les étapes de calcul suivantes :

✓ Le débit massique total d'alimentation (F_0) peut s'écrire :

$$F_0 = F_0^{\varepsilon} \cdot m_0^{\varepsilon} + F_0^{I} \cdot m^{I}$$
 Eq. 2-36

 F_0^{ε} , F_0^{I} sont respectivement les débits molaires d'alimentation en monomère et en amorceur.

✓ Si on exprime le rapport $[M_0]/[I_0]$ par le rapport des débits molaire $F_0^{\varepsilon}/F_0^{I}$, on a :

$$\frac{F_0^{\varepsilon}}{F_0^I} = \frac{[M_0]}{[I_0]} \qquad \Longrightarrow \qquad F_0^I = \left(\frac{[M_0]}{[I_0]}\right)^{-1} \cdot F_0^{\varepsilon} \qquad \qquad \text{Eq. 2-37}$$

✓ En remplaçant l'expression de F_0^I dans l'équation Eq. 2-36, on obtient la relation donnant le débit massique d'alimentation en monomère F_0^{ε} :

$$F_0^{\varepsilon} = F_0 \cdot \left(m^{\varepsilon} + \left(\frac{[M_0]}{[I_0]} \right)^{-1} \cdot m^I \right)^{-1} \cdot m^{\varepsilon}$$
 Eq. 2-38

Le débit massique d'alimentation en amorceur est alors donné par :

$$F_0^I = F_0 - F_0^{\varepsilon}$$
 Eq. 2-39

Remarque : le bilan matière en amorceur permet d'avoir la propagation de ce dernier le long de l'extrudeuse. En effet, contrairement au monomère, l'amorceur est une substance qui n'est pas consommée durant la réaction. Cependant, ce bilan permettra d'évaluer le nombre de moles d'amorceur dans chaque réacteur et au cours du temps. Il sera par la suite utilisé dans les différentes équations lors du calcul de la vitesse de réaction ou de la viscosité.

Un autre point à considérer concerne le calcul de la concentration en amorceur $[I_i]$ dans chaque réacteur. Jusqu'à présent, ce rapport est considéré comme étant constant c'est-àdire que sa valeur est la même tout le long de l'extrudeuse. Effectivement, en régime stationnaire la concentration en amorceur reste toujours constante néanmoins cette affirmation n'est plus vraie en régime transitoire. En effet, si par exemple on applique un échelon du rapport $[M_0]/[I_0]$ à l'entrée de l'extrudeuse, il est évident que cette variation ne se produit pas instantanément tout le long de l'extrudeuse, donc la concentration en amorceur n'est pas modifiée instantanément dans toute l'extrudeuse. Il est alors nécessaire de prendre en considération ce phénomène en calculant le rapport $[M_i]/[I_i]$ de chaque réacteur à chaque instant. Ce rapport est calculé comme suit :

$$\frac{[M_i]}{[I_i]} \approx \frac{masse_{totale}}{masse_{totale}} \frac{du}{de} \frac{monomère}{l'initiateur} \frac{dans}{dans} \frac{le}{le} \frac{réacteur}{i}$$

Sachant que la masse totale du monomère dans le réacteur *i* est égale à :

$$M_{tot\,i}^{\varepsilon} = M_{lib}^{\varepsilon} + M_{c}^{\varepsilon}$$

avec M_{lib}^{ε} la masse du monomère libre et M_{c}^{ε} la masse du monomère consommé

on obtient :

$$\frac{[M_i]}{[I_i]} = \frac{m^I}{m^{\varepsilon}} \cdot \frac{\left(\rho_m V_i f_i\right) - \left(m^I n_i^I\right)}{\left(m^I n_i^I\right)}$$
Eq. 2-40

D'autre part, la réaction de polymérisation en masse de l' ε -caprolactone est une réaction qui induit une augmentation très importante de la viscosité. Une différence de cinq à six décades peut avoir lieu entre la viscosité de la matière à l'entrée et la sortie de l'extrudeuse. Cette augmentation a évidemment une influence considérable sur les paramètres d'écoulement d'où la nécessité de prendre en compte le couplage entre la réaction chimique et la thermomécanique de l'écoulement. Par conséquent, la viscosité est calculée dans chaque réacteur afin de pouvoir suivre temporellement son évolution le long de l'extrudeuse. Le calcul se fait en utilisant les lois cinétiques et rhéologiques définies par Gimenez (1999) et en tenant compte de l'état de chaque réacteur (température matière, taux de remplissage,...). Parmi ces paramètres, il est nécessaire de connaître la fraction volumique du polymère φ_i (Eq. 2-24). Celle-ci est donnée par la relation suivante en supposant que les volumes massiques des polymères et monomères sont égaux :

$$\varphi_i(t) = \frac{(masse \ du \ polymère)_i}{(masse \ totale)_i} = l - \frac{(masse \ du \ monomère)_i}{(masse \ totale)_i}$$
Eq. 2-41

Soit :

$$\varphi_{i}(t) = 1 - \frac{M_{i}^{\varepsilon}(t)}{\rho_{m}V_{i}f_{i}}$$
 Eq. 2-42

où ρ_m est la densité de la matière (constante tout le long de l'extrudeuse), $M_i^{\varepsilon}(t)$ la masse du monomère restant dans le réacteur à l'instant t, V_i le volume total libre du réacteur i et f_i le taux de remplissage dans le réacteur i à un instant t.

2.5. ASPECT THERMIQUE DU MODELE

2.5.1 INTRODUCTION

Les extrudeuses bivis sont principalement utilisées dans trois domaines d'application : l'agroalimentaire, la plasturgie et la fabrication de pâte à papier. Quel que soit le domaine d'application, la matière utilisée dans le procédé d'extrusion subit d'importantes transformations de sa structure et de ses caractéristiques thermodynamiques et rhéologiques. Les écoulements de la matière dans les vis et les transferts de chaleur entre la matière et le fourreau sont conditionnés par ces caractéristiques. La connaissance du comportement de la matière et la maîtrise des transferts de chaleur sont des éléments fondamentaux pour le contrôle de la qualité du produit fabriqué. En effet, chaque procédé a besoin de conditions thermiques spécifiques parfaitement contrôlées pour fonctionner de manière optimale. Pour cela, un apport thermique se révèle nécessaire pour la majorité des applications existantes. Les fourreaux peuvent être chauffés ou refroidis en fonction du produit extrudé. De plus, un système de régulation est intégré dans l'extrudeuse afin de maintenir le fourreau à une température de fonctionnement donnée.

Cette section est donc consacrée à l'étude des transferts de chaleur dans les procédés d'extrusion. Nous allons décrire l'élaboration du modèle thermique. Ce dernier est établi à partir de l'écriture des bilans d'énergie sur la matière, le fourreau et les vis. Ce modèle a été élaboré en se reposant sur le modèle d'écoulement, le modèle réactionnel et en prenant en compte les différents transferts de chaleur pouvant exister au sein de l'extrudeuse.

2.5.2 CALCUL DES DISSIPATIONS VISQUEUSES :

Le comportement thermique de la matière au sein de l'extrudeuse est fortement influencé par l'apport de chaleur dû aux dissipations visqueuses. Martelli (1982) évalue les dissipations visqueuses par le calcul du taux de cisaillement $\dot{\gamma}$ approprié à chaque volume cisaillé selon les modèles développés en extrusion monovis tel que :

$$\gamma = \frac{vitesse \ del'écoulement}{épaisseur \ cisaillée}$$
 Eq. 2-43

Il estime que les dissipations visqueuses sont générées dans le chenal des vis et dans les différents jeux géométriques (Figure 2-17). Il détermine quatre termes source (Z_1 à Z_4) avec :

- \succ Z₁ dans le chenal : *H*,
- > Z_2 entre le sommet du filet des vis et la surface interne du fourreau : δ ,
- > Z_3 entre le sommet du filet d'une vis et le fond du chenal de l'autre vis : ε ,
- > Z_4 entre les flancs de filet des deux vis : σ .

Ces termes sont calculés par la relation suivante :

$$Z_i = \eta \cdot \dot{\gamma}_i^2 \cdot v_i$$
 Eq. 2-44

où Z_i est la puissance générée par dissipations visqueuses dans la zone *i* (*W*), η la viscosité de la matière (*Pa.s*), $\dot{\gamma}_i$ le taux de cisaillement dans la zone *i* (s^{-1}), et v_i le volume cisaillé de la zone i (m^3).



Figure 2-17 : Dimensions géométriques des vis (d'après Chang et Halek, 1991)

Le taux de cisaillement et le volume cisaillé considérés dans l'approche de Martelli (1982) pour les quatre régions, où prennent naissance les dissipations visqueuses, sont récapitulés dans le Tableau 2-2:

Région	Taux de cisaillement	Volume cisaillé	Dissipation visqueuse
Chenal : Z_I	<i>π.D_e.N/H</i>	$n.\frac{\pi^2}{2}.D_{e}.D_{ext}.H.tan(\phi)$	$\frac{\pi^4 \cdot D_e \cdot D_{ext} \cdot tan(\phi)}{2 \cdot H} \cdot n \cdot \eta \cdot N^2 = C_1 \cdot \eta \cdot N^2$
Sommet de filet/fourreau : Z_2	$\pi D_{ext} N/\delta$	n.e. C_{e} . δ	$\frac{\pi^2 \cdot D_{ext}^2 \cdot e \cdot C_e}{\delta} \cdot n \cdot \eta \cdot N^2 = C_2 \cdot \eta \cdot N^2$
Sommet de filet/chenal : Z_3	2π.C _l .N/ε	2. <i>n.e</i> .C _l .ε	$\frac{8 \cdot \pi^2 \cdot C_l \cdot e}{\varepsilon} \cdot n \cdot \eta \cdot N^2 = C_3 \cdot \eta \cdot N^2$
Flancs de filet : Z_4	$\pi C_l N/\sigma$	$\frac{n}{2}\sqrt{D_{ext}^2-C_l^2}.H.\sigma$	$\frac{\pi^2 \cdot C_L^2 \cdot H \cdot \sqrt{\left(D_{ext}^2 - C_l^2\right)}}{2 \cdot \sigma} \cdot n \cdot \eta \cdot N^2 = C_4 \cdot \eta \cdot N^2$

Tableau 2-2: Calcul des dissipations visqueuses dans une extrudeuse bivis corotative (Martelli, 1982)

avec C_e , D_e respectivement circonférence et diamètre équivalents du circuit bivis (Yacu, 1985), e épaisseur du filet et C_l l'entraxe des vis.

Pour les éléments de vis à pas direct (ou inverse), les dissipations visqueuses totales Z sont estimées par :

$$Z = \left(\sum_{j=1}^{4} C_j\right) \cdot \eta \cdot N^2 = C \cdot \eta \cdot N^2$$
 Eq. 2-45

La dissipation visqueuse totale Z est calculée pour des éléments de vis d'une longueur égale à un pas. Donc, la dissipation visqueuse dq_{cis} générée dans les vis pour une longueur élémentaire dz est donnée par :

$$dq_{cis} = \frac{C \cdot \eta \cdot N^2}{\pi \cdot D_{evt} \cdot tan(\phi)} \cdot dz$$
 Eq. 2-46

Pour les éléments malaxeurs, les dissipations visqueuses sont calculées suivant une méthode similaire (chenal et jeux géométriques) (Figure 2-18). Chang et Halek (1991) ont calculé la dissipation visqueuse pour un bloc malaxeur composé de cinq disques à 45° à partir de la relation suivante :

$$dq_{cis} = \left(\frac{\pi^2 \cdot D_{ext}^2 \cdot A_f \cdot l_k}{H^2} + \frac{2 \cdot \pi^2 \cdot D_{ext}^2 \cdot C_e \cdot (l_k - 4 \cdot l_0)}{\delta} + \frac{16 \cdot \pi^2 \cdot C_l^2 \cdot \overline{w} \cdot (l_k - 4 \cdot l_0)}{\varepsilon}\right) + \frac{1}{l_k} \cdot \eta \cdot N^2 \cdot dz \qquad \text{Eq. 2-47}$$

où A_f est la section transversale libre d'un disque malaxeur (m^2) , l_k longueur totale d'un bloc malaxeur, \overline{w} longueur du méplat d'un disque malaxeur, l_0 longueur du raccordement entre deux disques successifs d'un bloc malaxeur.

Par ailleurs, cette relation peut être appliquée pour des blocs malaxeurs de configuration différente de celle utilisée par Chang et Halek (nombre de disque et angle).



Figure 2-18 : Dimensions géométriques d'un bloc malaxeur composé de cinq disques à 45° (Chang et Halek, 1991)

Les deux auteurs Martelli (1982) et Yacu (1985) considèrent que les dissipations visqueuses sont négligeables dans les zones partiellement remplies. D'un autre côté, Kulshrestha et al. (1991, 1992) estiment qu'effectivement les dissipations visqueuses dans ces zones sont faibles comparées à celles générées dans les zones entièrement remplies mais qu'elles ne sont pas pour autant négligeables. Dans les zones partiellement remplies, Kulshrestha et al. (1991, 1992) estiment qu'en absence des débits de reflux dans ces zones, la composante Z_2 (elle concerne la région située entre le sommet des filets et la surface interne du fourreau) ne contribue pas à la génération des dissipations visqueuses.

Ils estiment alors les dissipations visqueuses totales dq_{cis} générées dans des vis de longueur dz, selon la zone considérée, par la relation suivante :

$$dq_{cis} = \frac{\chi_i \cdot C \cdot \eta \cdot N^2}{\pi \cdot D_{ext} \cdot \tan(\phi)} \cdot dz$$
 Eq. 2-48

où C une constante géométrique. Elle est donné par :

• Zone de fusion (entièrement remplie) :

$$C = C_m = \frac{\pi^4 \cdot D_e \cdot D_{ext} \cdot tan(\phi)}{2 \cdot H} + \frac{\pi^2 \cdot D_{ext}^2 \cdot e \cdot C_e}{\delta} + \frac{8 \cdot \pi^2 \cdot C_l \cdot ef}{\varepsilon} + \frac{\pi^2 \cdot C_l^2 \cdot H \cdot \sqrt{D_{ext}^2 - C_l^2}}{2 \cdot \sigma}$$
Eq. 2-49

• Zone de convoyage solide (partiellement remplie) :

$$C = C_s = \frac{\pi^4 \cdot D_e \cdot D_{ext} \cdot tan(\phi)}{2 \cdot H} + \frac{8 \cdot \pi^2 \cdot C_l \cdot e}{\varepsilon} + \frac{\pi^2 \cdot C_l^2 \cdot H \cdot \sqrt{D_{ext}^2 - C_l^2}}{2 \cdot \sigma}$$
Eq. 2-50

et χ_i est le facteur de dissipation visqueuse. Ce dernier est fonction du taux de remplissage de la i^{eme} zone (i^{eme} réacteur). Comme première approximation, Kulshrestha et al. (1991) supposent que ce facteur varie linéairement avec le taux de remplissage :

$$\chi_i = a + (1 - a) \cdot f \qquad \text{Eq. 2-51}$$

avec *a* une constante (a = 0.0858)

La dissipation visqueuse est alors pondérée par un facteur variant linéairement avec le taux de remplissage. Donc, plus le taux de remplissage est grand et plus la dissipation est importante. De cette manière, Kulshrestha prend en considération les dissipations visqueuses dans toutes les zones (entièrement ou partiellement remplies).
2.5.3 <u>COEFFICIENT D'ECHANGE DE CHALEUR</u>

Le coefficient d'échange de chaleur entre la matière et le fourreau est un paramètre clé lors du développement du modèle thermique. Ce dernier peut être déterminé expérimentalement par identification en utilisant un modèle basé sur l'écriture du bilan d'énergie et une expérience. On trouve des corrélations entre nombres adimensionnels qui résument le résultat d'un grand nombre d'expérience dans une configuration donnée.

Le coefficient d'échange thermique n'a pas de valeur fixe, il peut varier d'un procédé à l'autre selon la nature de la matière utilisée (polymère, farine de blé,...), son état (liquide, solide), la qualité de la surface de contact (caractères plus au moins lisse,...),...etc.

La synthèse des modèles de transferts de chaleur dans les extrudeuses permet de répertorier les diverses valeurs du coefficient d'échange. Ainsi, dans son étude sur le procédé d'extrusion de la farine de blé, Yacu (1985) a utilisé la technique d'identification pour estimer le coefficient d'échange dans la zone de transport solide et les zones où la matière est à l'état fondu. Il a estimé le coefficient d'échange à $30 W.m^{-2}.K^{-1}$ dans la zone de transport solide et à $500 W.m^{-2}.K^{-1}$ dans la zone de transport liquide. Utilisant la même technique, Chang et Halek (1991) ont trouvé que la valeur du coefficient d'échange varie entre $115 à 205 W.m^{-2}.K^{-1}$ dans la zone fondue. Enfin, dans le but de limiter le nombre de coefficients à identifier dans le modèle statique développé, Kulshrestha et al. (1991) ont considéré que le coefficient d'échange dans la zone de convoyage solide et celui de la zone à l'état fondu sont reliés par la relation suivante :

$$U_s = f \cdot U_m$$
 Eq. 2-52

avec f est le taux de remplissage, U_s et U_m sont respectivement le coefficient d'échange entre la matière et le fourreau dans la zone à l'état solide et fondu.

La valeur du coefficient d'échange identifié est de $10.41 \ KW.m^{-2}$ ° C^{-1} , les auteurs considèrent que cette valeur est relativement importante mais raisonnable.

D'autre part, Todd (1988) a estimé le coefficient d'échange entre un polymère et le fourreau pour une extrudeuse bivis et a présenté ses résultats sous la forme de la corrélation suivante :

$$Nu=0.94 \left(\frac{D_{ext}^2 \cdot N \cdot \rho_m}{\eta}\right)^{0.28} \left(\frac{C_p \cdot \eta}{\lambda}\right)^{0.33} \left(\frac{\eta}{\eta_p}\right)^{0.14}$$
Eq. 2-53

où D_{ext} le diamètre extérieur des vis (m), N la vitesse de rotation des vis $(tr.s^{-1})$, ρ_m la densité de la matière $(kg.m^{-3})$, η la viscosité de la matière dans le chenal des vis (Pa.s), C_p la chaleur spécifique de la matière $(J.kg^{-1}.K^{-1})$, λ la conductivité thermique de la matière, et η_p la viscosité de la matière au niveau de la paroi interne du fourreau.

L'utilisation de cette corrélation nécessite la connaissance de la viscosité de la matière au niveau de la paroi interne du fourreau. On peut considérer en première approximation que c'est la même que dans le chenal des vis.

Poulesquen (2001) quant à lui, a fixé une valeur du nombre de Nüsselt au niveau fourreau égale à 25 le long des vis et un nombre de Nüsselt égal à 1 dans la filière. Ceci correspond à un coefficient de transfert thermique égal à $1250 W.m^{-2}.K^{-1}$ le long des vis et $50 W.m^{-2}.K^{-1}$ dans la filière.

Dans son étude sur la polymérisation en masse du n-butylméthacrylate dans une extrudeuse bivis contrarotative, Ganzeveld (1994) s'est basé sur un modèle empirique pour calculer le coefficient d'échange entre le polymère et le fourreau. Le coefficient d'échange a été déterminé à partir du bilan énergétique établi pour une chambre en «*C* » interagissant avec ses voisines. Le coefficient d'échange ainsi développé dépend de la vitesse de rotation des vis et du débit relatif de l'extrudeuse (α_r : sans dimension) :

$$U = 410 \cdot \left(\frac{N}{0.174}\right)^{1.65 - 2.36\alpha_r}$$
 Eq. 2-54

avec N vitesse des vis (s^{-1}) et U coefficient d'échange de chaleur fourre/matière $(W.m^{-2}.K)$.

2.5.4 ENTHALPIE DE REACTION :

La polymérisation de l'ɛ-caprolactone est une réaction très exothermique. Pour prendre en compte ce phénomène lors de la modélisation il est nécessaire de connaître l'enthalpie de réaction.

Poulesquen (2001) a fait quelques mesures de DSC (Differential Scanning Calorimeter) afin d'avoir un ordre de grandeur de la valeur de l'enthalpie. L'auteur suppose que la valeur de l'enthalpie est indépendante du rapport monomère-initiateur $[M]/[I_0]$. Le rapport du mélange réactif monomère-initiateur choisi pour cette expérience est égal à 800. Le mélange est ensuite introduit dans des capsules. L'auteur choisit une montée en température de un degré par minute afin de favoriser le transfert thermique entre la capsule et le mélange réactif.

La Figure 2-19 représente l'évolution de la chaleur dégagée en fonction de la température (Poulequen, 2001). Après analyse et traitement des résultats, l'auteur obtient une valeur d'enthalpie de réaction (ΔH_r) égale à 245 *J/g*. La valeur trouvée a été ensuite comparée avec les données de la littérature qui ont corroboré sa validité. Nous avons choisi d'utiliser cette valeur dans le modèle thermique que nous présentons dans les sections qui vont suivre.



Figure 2-19 : Enthalpie de réaction de l'ɛ-caprolactone mesurée par DSC (Poulesquen, 2001)

2.5.5 BILAN D'ENERGIE :

L'ensemble des travaux que nous venons de citer montre l'intérêt croissant porté à la compréhension et à la prédiction des transferts de chaleur dans les extrudeuses bivis. En effet, l'extrusion bivis est un procédé qui est fortement anisotherme. Le calcul des profils de température constitue donc un point très important. Cependant, le développement du modèle thermique nécessite, comme nous l'avons déjà souligné, la connaissance des mécanismes d'écoulement et de transfert dans l'extrudeuse. D'autre part, certains paramètres du modèle ne sont pas toujours connus avec précision. Ils sont souvent fixés au cas par cas de telle sorte que le comportement du modèle se rapproche du procédé réel. On peut citer, en particulier, le coefficient de transfert de chaleur entre la matière et le fourreau. Ce dernier est évalué soit par identification soit par corrélation. Selon le type d'application, il peut varier entre 30 et 2000 $W.m^{-2}.K^{-1}$. Concernant le coefficient de transfert entre la matière et les vis, il est généralement choisi égal à zéro ($U_v = 0$). Dans la majorité des cas, les vis ne sont pas régulées thermiquement et l'utilisateur n'a aucune information sur la température de celles-ci.

Dans notre approche, le développement des différents modèles (écoulement, réaction et thermique) repose sur la décomposition de l'extrudeuse en une cascade de réacteurs parfaitement agités. L'intérêt de cette démarche est de simplifier l'élaboration et le calcul du modèle global à travers l'utilisation du réacteur parfaitement agité comme élément de base du modèle global. D'autre part, l'étude bibliographique révèle que le développement d'un modèle de transfert de chaleur est très complexe. En effet, la compréhension du comportement thermique de la matière et du fourreau (ou vis) au sein d'une extrudeuse bivis passe par une étude d'ensemble du procédé c'est-à-dire prenant en compte les écoulements le long des vis, l'évolution de la réaction, l'effet de la réaction sur la viscosité de la matière et sa répercussion sur les dissipations visqueuses,...etc. La complexité et le couplage des différents phénomènes ne permettent pas d'étudier chaque phénomène séparément.

Dans la majorité des cas, l'obtention du profil thermique (matière, fourreau ou vis) le long de l'extrudeuse, passe par la résolution de l'équation de bilan d'énergie. Celle-ci décrit les différents échanges ayant lieu entre la matière et le fourreau et/ou les vis. Comme nous l'avons souligné, le comportement dynamique des vis et du fourreau dans les échanges thermiques sont rarement pris en compte. Lors de l'élaboration du modèle thermique, nous avons choisi de les prendre en compte afin de modéliser l'ensemble des phénomènes thermique tels que les flux d'énergie, les échanges de chaleur avec l'extérieur par le fourreau, conduction dans le métal,...etc. De là, le modèle thermique est établi en écrivant les bilans d'énergie sur la matière en écoulement, le fourreau et les vis de manière à prendre en compte tous les échanges de chaleur existants au sein de l'extrudeuse (Figure 2-20).



Figure 2-20 : Représentation des échanges thermiques en extrudeuse sur un RCPA

Ce modèle est élaboré en posant les hypothèses suivantes :

- ✓ Le régime est transitoire,
- ✓ Les échanges de chaleur entre la matière et les vis sont pris en compte,
- ✓ Le fluide est considéré non-newtonien fortement visqueux thermodépendant : la viscosité est exprimée par une loi de Carreau pour le calcul du terme de dissipation visqueuse,
- ✓ La capacité calorifique et la densité sont constantes,
- ✓ La température dans les portions de vis et de fourreau associées à chaque réacteur est supposée uniforme.
- ✓ L'énergie associée à la réaction chimique est prise en compte

Le bilan d'énergie de la matière en écoulement dans le réacteur *i* est alors donné par :

$$f_{i} \cdot M_{i}^{m} \cdot C_{p}^{m} \cdot \frac{dT_{i}^{m}}{dt} = F_{i-1} \cdot C_{p}^{m} \cdot (T_{i-1}^{m} - T_{i}^{m}) + F_{i+1} \cdot C_{p}^{m} \cdot (T_{i+1}^{m} - T_{i}^{m}) + U_{f} \cdot f_{i} \cdot S_{f} \cdot (T_{i}^{f} - T_{i}^{m})$$

$$+ U_{v} \cdot f_{i} \cdot S_{v} \cdot (T_{i}^{v} - T_{i}^{m}) + f_{i} \cdot q_{i}^{cis} + f_{i} \cdot V_{i} \cdot r \cdot (-\Delta H_{r})$$
Eq. 2-55

où T_i^m , T_i^f , T_i^v sont respectivement les températures matière, fourreau et vis dans le réacteur *i*, U_f et U_v sont respectivement le coefficient d'échange matière/fourreau et matière/vis, V_i , f_i sont respectivement le volume total libre et le taux de remplissage du réacteur *i*, q_i^{cis} est la puissance générée par dissipation visqueuse, C_p^m la chaleur spécifique de la matière, $r(-\Delta H_r)$ est le terme caractérisant le flux de chaleur dégagée lors de la réaction, ΔH_r l'enthalpie de réaction et S_{f_i} S_v respectivement la surface d'échange fourreau/matière et vis/matière.

Au niveau de l'équation Eq. 2-55, les deux premiers éléments du terme de droite de l'égalité représentent l'énergie de convection due aux écoulements de la matière, le troisième et quatrième terme, caractérisent respectivement les échanges de chaleur fourreau/matière et vis/matière. Enfin, les deux derniers termes correspondent à la puissance générée par la dissipation visqueuse et par le flux de chaleur dû à la réaction.

Pour le calcul des dissipations visqueuses, nous avons procédé de la même manière que Yacu (1985). Toutefois, nous n'avons pas négligées les dissipations au niveau des zones partiellement remplies. Elles ont été calculées en utilisant les équations Eq. 2-48, Eq. 2-49 et Eq. 2-50. Notons que Kulshreshtha et al. (1991) ont pondéré les dissipations visqueuses, dans les zones partiellement remplies, par un facteur χ_i (Eq. 2-51) variant linéairement avec le taux de remplissage. Dans notre cas, nous avons préféré utiliser directement le taux de remplissage f_i comme facteur de pondération, sans passer par une relation dépendant d'un paramètre à identifier.

En ce qui concerne le calcul des coefficients d'échanges de chaleur (U_f et U_v), nous avons utilisé directement les valeurs déjà déterminées par Poulesquen (2001). Poulesquen a fait ses essais sur la polymérisation de l' ε -caprolactone en utilisant une extrudeuse bivis corotative à profils conjugués (Leistritz LMS 30-34) se trouvant au Laboratoire des Matériaux Polymères et Biomatériaux (LMPB- Université Lyon 1). C'est sur cette même extrudeuse que nous avons entrepris la modélisation de la polymérisation de l' ε -caprolactone. Ainsi, le fait d'avoir utilisé la même extrudeuse et le même produit justifie notre choix sur les valeurs des coefficients d'échange utilisées. Nous avons aussi fait la supposition que les coefficients d'échange U_f et U_v sont égaux. De plus, nous avons pondéré les échanges thermiques entre matière/fourreau et matière/vis par le taux de remplissage (Eq. 2-55) afin de prendre en considération les zones partiellement remplies.

Le bilan d'énergie de l'élément de fourreau associé est donné par :

$$M_{i}^{f} \cdot C_{p}^{f} \cdot \frac{dT_{i}^{f}}{dt} = U_{ext} \cdot S_{ext} \cdot \left(T_{ext} - T_{i}^{f}\right) + U_{f} \cdot f_{i} \cdot S_{f} \cdot \left(T_{i}^{m} - T_{i}^{f}\right) + \frac{\lambda_{f} \cdot S_{f}}{e_{i-1}} \cdot \left(T_{i-1}^{f} - T_{i}^{f}\right) + \frac{\lambda_{f} \cdot S_{f}}{e_{i}} \cdot \left(T_{i+1}^{f} - T_{i}^{f}\right) + \phi_{i}$$
Eq. 2-56

avec T_{ext} la température de l'air ambiant, λ_f la conductivité thermique du fourreau, s_f la section transversale du fourreau, U_{ext} le coefficient d'échange de chaleur entre le fourreau et l'air extérieur, ϕ_i l'énergie de chauffe ou de refroidissement du fourreau, e_i et e_{i-1} la distance moyenne entre deux réacteurs successifs.

On constate à travers l'équation Eq. 2-56 que la majorité des échanges thermiques ont été représentés. Le bilan d'énergie du fourreau prend en considération les échanges de chaleur fourreau/extérieur, fourreau/matière ainsi que la conduction thermique longitudinale dans le métal. Enfin, le dernier terme de cette équation représente l'énergie de chauffe du fourreau due aux résistances chauffantes électriques. Dans la littérature, la température du fourreau est considérée comme étant fixe. Elle correspond généralement à la température de régulation qu'on impose au fourreau. Dans notre étude, destinée justement à mettre au point un modèle pour la synthèse d'une loi de commande, cette hypothèse n'a aucun sens.

Enfin, le bilan d'énergie de l'élément de vis associé est donné par :

$$M_{i}^{\nu} \cdot C_{p}^{\nu} \cdot \frac{dT_{i}^{\nu}}{dt} = U_{\nu} \cdot f_{i} \cdot S_{\nu} \cdot (T_{i}^{m} - T_{i}^{\nu}) + \frac{\lambda_{\nu} S_{\nu}}{e_{i-1}} \cdot (T_{i-1}^{\nu} - T_{i}^{\nu}) + \frac{\lambda_{\nu} S_{\nu}}{e_{i}} \cdot (T_{i+1}^{\nu} - T_{i}^{\nu})$$
 Eq. 2-57

Comme pour le bilan d'énergie du fourreau, ce bilan d'énergie prend en compte l'ensemble des pouvant avoir lieu au niveau des vis de l'extrudeuse.

2.6. <u>CONSTRUCTION D'UN MODELE POUR UN PROCEDE</u> <u>D'EXTRUSION REACTIVE DONNE</u>

Dans cette section, nous allons résumer la méthodologie utilisée pour modéliser un procédé d'extrusion réactive en machine bivis. Un récapitulatif des différents sous-modèles développés (modèle d'écoulement, modèle thermique et le modèle réactionnel) est présenté en soulignant les points importants au niveau de chaque sous-modèle. Ceci afin de mieux illustrer les points importants au niveau de la mise en œuvre de chaque sous-modèle et en même temps donner aux lecteurs une vision synthétique du modèle global.

Ce résumé des différentes étapes de modélisation sera présenté sur l'exemple d'une mini-extrudeuse bivis corotative avec un profil de vis comportant des éléments de vis à pas direct et inverse avec une filière à jonc en fin de l'extrudeuse (Figure 2-21).



Figure 2-21 : Profil de vis utilisé pour illustrer l'exemple

2.6.1 MODELE D'ECOULEMENT

2.6.1.1 Construction du schéma d'écoulement

La mini-extrudeuse est divisée en sept zones, et chaque zone est approchée par un RCPA. On verra dans le chapitre 3 comment on peut déterminer ce nombre à partir des résultats expérimentaux de DTS. Les différents réacteurs décrivant le schéma d'écoulement de l'extrudeuse sont reliés entre eux par des débits directs et inverses. Ces derniers sont calculés en prenant en compte la géométrie des vis. La discrétisation de l'extrudeuse ainsi que sa représentation par des RCPA sont illustrés dans la Figure 2-22 :



Figure 2-22 : a) Discrétisation de l'extrudeuse ; b) Représentation du schéma d'écoulement par des RCPA

L'une des hypothèses de la modélisation est de considérer uniquement le cas où la matière est à l'état fondu. Le cas de l'écoulement à l'état solide n'a pas été abordé. La densité de la matière est supposée constante tout le long de l'extrudeuse. D'autre part, un morceau de fourreau et de vis sont associés à chaque réacteur afin de prendre en compte les échanges thermiques qui ont lieu entre le fourreau, la matière et les vis. La Figure 2-23 illustre l'élément de base sur lequel repose l'élaboration du modèle global.



Figure 2-23 : Elément de base du modèle global

L'écoulement dans le chenal est considéré comme une combinaison d'un écoulement de cisaillement entre plaques parallèles et d'un écoulement de Poiseuille plan (Tableau 2-1).

Au niveau de la filière, l'écoulement est approché par un écoulement de Poiseuille dans un tube de rayon et de longueur donnés (Eq. 2-9).

Pour une vis directe (réacteurs 1-3, 5-7), le débit direct circule dans le sens de l'avalement de matière et le débit de contre-pression réduit ce dernier lorsque le réacteur est plein. Dans le cas de la vis inverse (réacteur 4), le débit direct circule dans le sens opposé à l'avancement de la matière et c'est le débit de contre pression F' qui devient le débit moteur. D'après la Figure 2-22b, le débit de reflux F_4^r est donné par :

$$F_4^r = \frac{K_4^r}{\eta_4(T_4^m, \varphi_4)} \cdot (P_4 - P_5)$$
 Eq. 2-58

Cette représentation de la vis inverse concorde avec les observations expérimentales qui indiquent qu'un élément à pas inverse ou un bloc malaxeur inverse (décalé à gauche) sont toujours remplis. En effet, physiquement, lorsque le régime permanent est atteint, il est impossible que la pression s'annule au sein d'un élément restrictif, car quelles que soient les conditions expérimentales observées, ces éléments sont toujours pleins (Figure 2-5).

D'après l'équation Eq. 2-58, on remarque qu'il est nécessaire que le réacteur 4 soit entièrement rempli pour que la matière avance vers l'aval, c'est-à-dire que P_4 doit être strictement supérieure à P_5 sachant que dans les conditions normales de fonctionnement, la pression P_5 est égale à la pression atmosphérique P_0 (réacteur partiellement rempli).

La zone d'interconnexion entre le pas de vis direct et le pas de vis inverse a été introduite et assimilée à un écoulement de Poiseuille simple. Comme nous avons déjà souligné dans la section 2.3.1, il était nécessaire de rajouter cet écoulement au niveau de la jonction « *vis directe – vis inverse* » afin de prendre en compte le mouvement en direction opposée de chacune des vis (Agassant et al., 1996).

D'après la Figure 2-22b, le réacteur 4 représente la vis inverse. L'écoulement au niveau de la zone d'interconnexion est représenté par le débit F^p . Ce dernier peut être calculé comme suit :

$$F^{p} = \frac{K^{p}}{\eta_{m}} \left(P_{4} - P_{5} \right)$$
 Eq. 2-59

avec K^P coefficient géométrique qui caractérise la zone d'interconnexion (voir Eq. 2-7), η_m la viscosité moyenne calculée entre les deux éléments de la jonction.

La nécessité de rajouter ce débit apparaît de manière très claire en faisant une analyse simple sur le schéma d'écoulement (Figure 2-24). Si on suppose par exemple que le réacteur n°4, caractérisant la vis inverse, est entièrement rempli alors on a une continuité des débits au niveau de ce réacteur (la somme des débits entrants est égale à la somme des débits sortants). Le principe de continuité des débits est la base sur laquelle repose le calcul des pressions dans les différents réacteurs constituant le schéma d'écoulement.



Figure 2-24 : Analyse de la zone d'interconnexion : a) sans écoulement de Poiseuille b) avec écoulement de Poiseuille

Dans le cas où on néglige le débit F^p (Figure 2-24a), on obtient l'équation de continuité suivante :

$$f_{4}=1 \implies F_{3}^{d} + F_{5}^{r} = F_{4}^{r} + F_{4}^{d}$$
$$\implies F_{3}^{d} + \frac{K_{5}^{r}}{\eta_{5}} \left(P_{5} - P_{4}\right) = \frac{K_{4}^{r}}{\eta_{4}} \left(P_{4} - P_{5}\right) + F_{4}^{d}$$
$$\implies \left(\frac{K_{5}^{r}}{\eta_{5}} + \frac{K_{4}^{r}}{\eta_{4}}\right) \cdot P_{5} - \left(\frac{K_{5}^{r}}{\eta_{5}} + \frac{K_{4}^{r}}{\eta_{4}}\right) \cdot P_{4} = F_{4}^{d} - F_{3}^{d}$$
Eq. 2-60

De la même manière, en prenant en compte le débit de Poiseuille (Figure 2-24b), on a :

$$f_{4}=1 \implies F_{3}^{d} + F_{5}^{r} = F_{4}^{r} + F_{4}^{d} + F^{p}$$
$$\Rightarrow \left(\frac{K_{5}^{r}}{\eta_{5}} + \frac{K_{4}^{r}}{\eta_{4}}\right) \cdot P_{5} - \left(\frac{K_{5}^{r}}{\eta_{5}} + \frac{K_{4}^{r}}{\eta_{4}} + \frac{K^{p}}{\eta_{m}}\right) \cdot P_{4} + \left(\frac{K^{p}}{\eta_{m}}\right) \cdot P_{3} = F_{4}^{d} - F_{3}^{d} \qquad \text{Eq. 2-61}$$

 η_m : la viscosité moyenne entre les réacteurs 3 et 4.

D'après l'équation de continuité Eq. 2-60, on constate qu'il n'y a aucun terme en fonction de P_3 contrairement à l'équation Eq. 2-61 dans laquelle le débit F^p a été pris en compte. En effet, en l'absence du débit de Poiseuille F^p on crée une discontinuité au niveau des pressions et le calcul de la pression P_4 devient indépendant de la pression P_3 . L'ajout du débit F^p permet donc de créer une continuité au niveau du calcul des pressions et en même temps de prendre en compte les différents écoulements qui peuvent avoir lieu au niveau de la jonction entre la vis à pas direct et la vis à pas inverse. Globalement, la pression au niveau d'un réacteur quelconque du schéma d'écoulement dépend de la pression du réacteur se trouvant en amont et en aval de ce dernier.

2.6.1.2 Bilans de masse globaux et calcul de pression

Une fois l'extrudeuse discrétisée sous forme d'une cascade de RCPA, l'étape suivante consiste à écrire le bilan masse global de chaque réacteur selon le schéma d'écoulement obtenu (Figure 2-22b) en prenant comme variable d'état le taux de remplissage :

$$\begin{cases} \rho_{m}V_{1}\frac{df_{1}}{dt} = F_{0} - F_{1}^{d} - F_{1}^{r} + F_{2}^{r} \\ \rho_{m}V_{2}\frac{df_{2}}{dt} = F_{1}^{d} - F_{2}^{d} - F_{2}^{r} + F_{3}^{r} \\ \rho_{m}V_{3}\frac{df_{3}}{dt} = F_{2}^{d} - F_{3}^{d} - F_{3}^{r} + F_{4}^{d} + F^{P} \\ \rho_{m}V_{4}\frac{df_{4}}{dt} = F_{3}^{d} - F_{4}^{d} - F^{P} - F_{4}^{r} + F_{5}^{r} \\ \rho_{m}V_{5}\frac{df_{5}}{dt} = F_{4}^{r} - F_{5}^{d} - F_{5}^{r} + F_{6}^{r} \\ \rho_{m}V_{5}\frac{df_{5}}{dt} = F_{5}^{d} - F_{5}^{d} - F_{5}^{r} + F_{6}^{r} \\ \rho_{m}V_{6}\frac{df_{6}}{dt} = F_{5}^{d} - F_{6}^{d} - F_{7}^{r} \\ \rho_{m}V_{7}\frac{df_{7}}{dt} = F_{6}^{d} - F_{f}^{P} - F_{7}^{r} \end{cases}$$
Eq. 2-62

Avec ρ_m la densité moyenne de la matière, V_i le volume libre dans chaque réacteur, f_i le taux de remplissage du réacteur i (i=1,...,7) et F_0 le débit d'alimentation.

Partant d'un état initial nul, c'est-à-dire que l'extrudeuse est vide ($f_i=0$), celle-ci se remplit au fur et à mesure que la matière avance avec un débit d'alimentation et une vitesse de rotation des vis donnés. Tant que le réacteur *i* est partiellement rempli ($f_i<1$), la pression y est égale à la pression atmosphérique P_0 . Ceci implique qu'aucun débit de reflux n'est créé au niveau de ce réacteur. Par contre, si le réacteur est entièrement rempli ($f_i=1$), dans ce cas nous avons une élévation de la pression donc création d'un gradient de pression qui engendre un débit de reflux.

Nous allons illustrer le calcul des pressions en choisissant un état stationnaire de l'extrudeuse dans lequel on suppose que tous les éléments restrictifs du profil de vis sont pleins. Dans ce cas de figure, le vecteur du taux de remplissage est donné par : $f^T = (f_1 \ f_2 \ 1 \ 1 \ f_5 \ f_6 \ 1)$. Les réacteurs n° 3, 4 et 7 sont entièrement remplis donc leur pression est supérieure à la pression atmosphérique. Il faut calculer les pressions dans ces réacteurs pour en déduire les débits de reflux engendrés. Les réacteurs n° 1, 2, 5 et 6 sont partiellement remplis et leur pression est égale à la pression atmosphérique.

Le fait que les réacteurs n° 3, 4 et 7 soient entièrement remplis nous permet d'écrire les équations de continuité suivantes (voir Figure 2-22b):

• Réacteur n°3 :

$$f_3=1 \implies F_2^d + F_4^d + F^p = F_3^d + F_3^r$$

$$\Rightarrow F_2^d - F_3^d + F_4^d = -\frac{K_3^r}{\eta_3} \cdot P_2 + \left(\frac{K_3^r}{\eta_3} + \frac{K^p}{\eta_m}\right) \cdot P_3 - \frac{K^p}{\eta_m} \cdot P_4$$
 Eq. 2-63

• Réacteur n°4 :

$$f_{4}=1 \implies F_{3}^{d} + F_{5}^{r} = F_{4}^{r} + F_{4}^{d} + F^{p}$$
$$\implies F_{3}^{d} - F_{4}^{d} = -\left(\frac{K_{5}^{r}}{\eta_{5}} + \frac{K_{4}^{r}}{\eta_{4}}\right) \cdot P_{5} + \left(\frac{K_{5}^{r}}{\eta_{5}} + \frac{K_{4}^{r}}{\eta_{4}} + \frac{K^{p}}{\eta_{m}}\right) \cdot P_{4} - \left(\frac{K^{p}}{\eta_{m}}\right) \cdot P_{3} \qquad \text{Eq. 2-64}$$

• Réacteur n°7 :

$$f_7 = 1 \implies F_6^d = F_f^p + F_7^r$$
$$\implies F_6^d - \frac{K_f^p}{\eta_{fil}} \cdot P_f = -\frac{K_7^r}{\eta_7} \cdot P_6 + \left(\frac{K_7^r}{\eta_7} + \frac{K_f^p}{\eta_{fil}}\right) \cdot P_7$$
Eq. 2-65

avec P_f pression en filière égale à la pression atmosphérique

Le calcul des pressions dans les différents réacteurs se fait en se basant sur les équations de continuité. A partir de celles-ci on construit un système d'équations algébriques linéaires sous la forme « $A \cdot P = B$ » où A est une matrice carrée inversible de dimension $n_c \times n_c$ (n_c est le nombre total de réacteurs en cascade), P est le vecteur de pression et B un vecteur de dimension ($n_c \times 1$).

L'obtention des pressions dans chaque réacteur est alors obtenue en résolvant le système d'équations :

$$A \cdot P = B \implies P = A^{-1} \cdot B$$
 Eq. 2-66

Pour l'exemple choisi $(f^T = (f_1 \ f_2 \ 1 \ 1 \ f_5 \ f_6 \ 1))$, le système d'équations obtenu est donné par :

 $P = A^{-1} \cdot B$

 \Rightarrow

$$\begin{bmatrix} R \\ P_{2} \\ P_{3} \\ P_{4} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -\frac{K_{3}}{\eta_{3}} \left(\frac{K_{3}}{\eta_{3}} + \frac{K^{p}}{\eta_{m}} \right) & -\frac{K^{p}}{\eta_{m}} & 0 & 0 & 0 \\ P_{4} \\ P_{4} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 & 0 & -\frac{K_{3}}{\eta_{3}} \left(\frac{K_{3}}{\eta_{3}} + \frac{K^{p}}{\eta_{m}} \right) & -\frac{K_{3}}{\eta_{3}} + \frac{K^{p}}{\eta_{m}} \right) & -\left(\frac{K_{3}}{\eta_{5}} + \frac{K_{4}}{\eta_{4}} \right) & 0 & 0 \\ P_{4} \\ P_{4} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 & 0 & -\frac{K_{3}}{\eta_{3}} \left(\frac{K_{3}}{\eta_{3}} + \frac{K^{p}}{\eta_{m}} \right) & -\frac{K^{p}}{\eta_{m}} & 0 & 0 & 0 \\ P_{4} \\ P_{4} \\ P_{5} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ P_{5} \\ P_{5} \\ P_{5} \end{bmatrix} + \frac{K^{p}}{\eta_{5}} + \frac{K^{p}}{\eta_{5}} + \frac{K^{p}}{\eta_{m}} \end{bmatrix} - \left(\frac{K_{5}}{\eta_{5}} + \frac{K_{4}}{\eta_{4}} \right) & 0 & 0 \\ P_{5} \\ P$$

Comme on peut le constater, les lignes de la matrice correspondant aux réacteurs pleins (réacteur n°3, 4 et 7) sont calculées à partir des équations de continuités des débits (Eq. 2-62, Eq. 2-63 et Eq. 2-64). Dans le cas des réacteurs partiellement remplis (réacteurs n°1, 2, 5 et 6) la pression est égale à la pression P_0 . Il suffit donc de mettre la valeur 1 dans la diagonale de la matrice A et la valeur P_0 dans le vecteur B.



Figure 2-25 : organigramme du modèle dynamique d'écoulement

D'un point de vue mathématique, il s'agit d'un système algébro-différentiel dont la particularité est que sa structure évolue en fonction des endroits où les taux de remplissages deviennent égaux à 1.

2.6.2 PRISE EN COMPTE DES ECHANGES THERMIQUES :

Après avoir illustré, à travers l'exemple de la mini-extrudeuse, la démarche à suivre pour développer le modèle d'écoulement, nous allons dans cette section présenter l'élaboration du modèle thermique en se basant sur le même exemple. Ceci nous permettra de revoir d'une manière plus explicite les différentes démarches adoptées lors de la modélisation des transferts de chaleur au sein d'une extrudeuse bivis corotative.

2.6.2.1 Dissipations visqueuses et coefficient d'échange de chaleur :

Ce qui va conditionner l'évolution de la température matière au sein de l'extrudeuse, c'est d'une part la puissance dissipée par déformation, et d'autre part les échanges thermiques entre le fourreau et la vis. Le calcul de la puissance générée par dissipation visqueuse est donné par la l'équation Eq. 2-44 et les dissipations visqueuses pour les différentes régions sont récapitulées dans le Tableau 2-2.

Ainsi, pour un élément de vis de longueur Δz , la dissipation visqueuse totale est donnée par la relation suivante :

$$\Delta q_{cis} = \frac{C \cdot \eta \cdot N^2}{\pi \cdot D_{evt} \cdot tan(\phi)} \cdot \Delta z$$
 Eq. 2-67

où $C = \left(\sum_{j=1}^{4} C_j\right)$: une constante géométrique (voir Tableau 2-2), D_{ext} : diamètre extérieur des vis, N: vitesse de rotation et ϕ : l'angle d'hélice de la vis.

Martelli (1982) et Yacu (1985) estiment que les dissipations visqueuses ont lieu dans les zones entièrement remplies et qu'elles sont négligeables dans les zones partiellement remplies. Par ailleurs, Kulshrestha et al. (1991, 1992) indiquent que dans les zones partiellement remplies la puissance générée par dissipation est faible comparée à celle générée dans les zones pleines mais qu'elle n'était pas pour autant négligeable. Pour le calcul des dissipations visqueuses nous avons opté pour l'option qui consiste à ne pas négliger la puissance générée dans les zones partiellement remplies. De plus, nous avons pondéré cette puissance par le taux de remplissage f_i .

Ainsi, la puissance générée par dissipation dans un réacteur *i* est donnée par :

$$q_i^{cis} = \frac{f_i \cdot C_i \cdot \eta_i \cdot N^2}{\pi \cdot D_{ext} \cdot tan(\phi_i)} \cdot \Delta z_i$$
 Eq. 2-68

Concernant le coefficient d'échange de chaleur, nous avons utilisé la valeur du coefficient d'échange identifiée par Poulesquen (2001) lors de son étude sur la polymérisation de l' ε -caprolactone en extrudeuse bivis corotative. D'un autre côté, la modélisation des échanges thermiques le long de l'extrudeuse a été faite en considérant les transferts thermiques qui ont lieu entre la matière et les vis. Pour celà, nous avons fait l'hypothèse que les coefficients d'échange de chaleur fourreau/matière (U_f) et vis/matière (U_v) sont égaux. Les surfaces d'échange ont été pondérées par le taux de remplissage afin de rendre compte de la réalité du contacte thermique entre les parties métalliques et la matière en écoulement.

2.6.2.2 Bilan thermique sur la matière le fourreau et les vis :

Comme pour le modèle d'écoulement, l'élaboration du modèle thermique est basée sur une approche monodimensionnelle qui consiste à se limiter à une estimation de la température moyenne dans chaque réacteur du schéma d'écoulement. Un morceau de fourreau et de vis ont été associés à chaque réacteur pour prendre en compte les échanges thermiques fourreau/matière et vis/matière (Figure 2-26). Les hypothèses de modélisation ont été citées dans la section 2.5.5.



Figure 2-26 : Représentation des échanges thermiques le long du schéma d'écoulement

Trois bilans d'énergie (matière, fourreau et vis) sont nécessaires pour l'élaboration du modèle thermique. En se basant sur l'exemple de la mini-extrudeuse, le bilan d'énergie de la matière pour les différents réacteurs est donné par :

$$\begin{cases} f_{1}\cdot M_{1}^{m} \frac{dT_{1}^{m}}{dt} = F_{0}\cdot C_{p}^{m}\cdot (T_{in} - T_{1}^{m}) + F_{2}^{r}\cdot C_{p}^{m}\cdot (T_{2}^{m} - T_{1}^{m}) + U_{f}\cdot f_{1}\cdot S_{f}^{1}\cdot (T_{1}^{f} - T_{1}^{m}) \\ + U_{v}\cdot f_{1}\cdot S_{v}^{1}\cdot (T_{1}^{v} - T_{1}^{m}) + f_{1}\cdot q_{1}^{cls} + f_{1}\cdot V_{1}\cdot r_{1}\cdot (-\Delta H_{r}) \\ f_{2}\cdot M_{2}^{m} \frac{dT_{2}^{m}}{dt} = F_{1}^{d}\cdot C_{p}^{m}\cdot (T_{1}^{m} - T_{2}^{m}) + F_{3}^{r}\cdot C_{p}^{m}\cdot (T_{3}^{m} - T_{2}^{m}) + U_{f}\cdot f_{2}\cdot S_{2}^{f}\cdot (T_{2}^{f} - T_{2}^{m}) \\ + U_{v}\cdot f_{2}\cdot S_{2}^{v}\cdot (T_{2}^{v} - T_{2}^{m}) + f_{3}\cdot q_{2}^{cls} + f_{2}\cdot V_{2}\cdot r_{2}\cdot (-\Delta H_{r}) \\ f_{3}\cdot M_{3}^{m} \frac{dT_{3}^{m}}{dt} = F_{2}^{d}\cdot C_{p}^{m}\cdot (T_{2}^{m} - T_{3}^{m}) + (F_{4}^{d} + F_{p})\cdot C_{p}^{m}\cdot (T_{4}^{m} - T_{3}^{m}) + U_{f}\cdot f_{3}\cdot S_{3}^{f}\cdot (T_{3}^{f} - T_{3}^{m}) \\ + U_{v}\cdot f_{3}\cdot S_{3}^{v}\cdot (T_{2}^{v} - T_{3}^{m}) + f_{3}\cdot q_{2}^{cls} + f_{3}\cdot V_{3}\cdot r_{3}(-\Delta H_{r}) \\ f_{4}\cdot M_{4}^{m} \frac{dT_{4}^{m}}{dt} = F_{3}^{d}\cdot C_{p}^{m}\cdot (T_{3}^{m} - T_{4}^{m}) + F_{5}^{c}\cdot C_{p}^{m}\cdot (T_{5}^{m} - T_{4}^{m}) + U_{f}\cdot f_{4}\cdot S_{4}^{f}\cdot (T_{4}^{f} - T_{4}^{m}) \\ + U_{v}\cdot f_{4}\cdot S_{4}^{v}\cdot (T_{4}^{v} - T_{4}^{m}) + f_{5}\cdot C_{p}^{cls} + f_{4}\cdot V_{4}\cdot r_{4}\cdot (-\Delta H_{r}) \\ f_{5}\cdot M_{5}^{m}\cdot \frac{dT_{5}^{m}}{dt} = F_{4}^{r}\cdot C_{p}^{m}\cdot (T_{5}^{m} - T_{5}^{m}) + f_{5}\cdot q_{5}^{cls} + f_{5}\cdot V_{5}\cdot r_{5}(-\Delta H_{r}) \\ f_{6}\cdot M_{6}^{m}\cdot \frac{dT_{6}^{m}}{dt} = F_{5}^{d}\cdot C_{p}^{m}\cdot (T_{5}^{m} - T_{6}^{m}) + F_{7}^{r}\cdot C_{p}^{m}\cdot (T_{7}^{m} - T_{6}^{m}) + U_{f}\cdot f_{6}\cdot S_{6}^{f}\cdot (T_{6}^{f} - T_{6}^{m}) \\ + U_{v}\cdot f_{6}\cdot S_{6}^{v}\cdot (T_{6}^{v} - T_{6}^{m}) + F_{7}^{r}\cdot C_{p}^{m}\cdot (T_{7}^{m} - T_{6}^{m}) + U_{f}\cdot f_{6}\cdot S_{6}^{r}\cdot (T_{6}^{f} - T_{6}^{m}) \\ f_{7}\cdot M_{7}^{m}\cdot \frac{dT_{7}^{m}}{dt} = F_{6}^{d}\cdot C_{p}^{m}\cdot (T_{6}^{m} - T_{7}^{m}) U_{f}\cdot f_{7}\cdot S_{7}^{r}\cdot (T_{7}^{m} - T_{7}^{m}) \\ + f_{7}\cdot q_{7}^{cls} + f_{7}V_{7}\cdot r_{7}(-\Delta H_{r}) \end{cases}$$

De la même manière que pour la matière, le bilan d'énergie des fourreaux est donné par :

$$\begin{cases} M_{1}^{f} \cdot C_{p}^{f} \cdot \frac{dT_{1}^{f}}{dt} = U_{ext} \cdot S_{ext} \cdot (T_{ext} - T_{1}^{f}) + U_{f} \cdot f_{1} \cdot S_{1}^{f} \cdot (T_{1}^{m} - T_{1}^{f}) + \frac{\lambda_{f} \cdot S_{f}}{e_{1}} \cdot (T_{2}^{f} - T_{1}^{f}) + \phi_{1} \\ M_{i}^{f} \cdot C_{p}^{f} \cdot \frac{dT_{i}^{f}}{dt} = U_{ext} \cdot S_{ext} \cdot (T_{ext} - T_{i}^{f}) + U_{f} \cdot f_{i} \cdot S_{i}^{f} \cdot (T_{i}^{m} - T_{i}^{f}) + \frac{\lambda_{f} \cdot S_{f}}{e_{i-1}} \cdot (T_{i-1}^{f} - T_{i}^{f}) \\ + \frac{\lambda_{f} \cdot S_{f}}{e_{i}} \cdot (T_{i+1}^{f} - T_{i}^{f}) + \phi_{i} \qquad pour \ i=2 \ a \ 6 \end{cases}$$

$$M_{7}^{f} \cdot C_{p}^{f} \cdot \frac{dT_{7}^{f}}{dt} = U_{ext} \cdot S_{ext} \cdot (T_{ext} - T_{7}^{f}) + U_{f} \cdot f_{7} \cdot S_{7}^{f} \cdot (T_{7}^{m} - T_{7}^{f}) + \frac{\lambda_{f} \cdot S_{f}}{e_{6}} \cdot (T_{6}^{f} - T_{7}^{f}) + \phi_{7} \end{cases}$$

Enfin, le bilan d'énergie des vis est donné par :

$$\begin{aligned} &M_{1}^{v} \cdot C_{p}^{v} \cdot \frac{dT_{1}^{v}}{dt} = U_{v} \cdot f_{1} \cdot S_{1}^{v} \cdot (T_{1}^{m} - T_{1}^{v}) + \frac{\lambda_{v} \cdot S_{v}}{e_{1}} \cdot (T_{2}^{v} - T_{1}^{v}) \\ &M_{i}^{v} \cdot C_{p}^{v} \cdot \frac{dT_{i}^{v}}{dt} = U_{v} \cdot f_{i} \cdot S_{i}^{v} \cdot (T_{i}^{m} - T_{i}^{v}) + \frac{\lambda_{v} \cdot S_{v}}{e_{i-1}} \cdot (T_{i-1}^{v} - T_{i}^{v}) + \frac{\lambda_{v} \cdot S_{v}}{e_{i}} \cdot (T_{i+1}^{v} - T_{i}^{v}) \quad pour \ i=2 \ a \ 6 \\ &M_{7}^{v} \cdot C_{p}^{v} \cdot \frac{dT_{7}^{v}}{dt} = U_{v} \cdot f_{7} \cdot S_{7}^{v} \cdot (T_{i}^{m} - T_{i}^{v}) + \frac{\lambda_{v} \cdot S_{v}}{e_{6}} \cdot (T_{6}^{v} - T_{7}^{v}) \end{aligned}$$

2.6.3 MODELISATION DE LA REACTION :

La troisième étape de la modélisation consiste à modéliser l'évolution de la réaction au sein de l'extrudeuse. La démarche de modélisation adoptée permet de prendre en compte n'importe quelle réaction à condition que toutes les données rhéocinétiques soient connues. Notre choix s'est porté sur la modélisation d'une réaction de polymérisation de l'ε-caprolactone car toutes les données rhéologiques et cinétiques étaient disponibles dans les travaux de recherches de Gimenez et al. (2000a). L'élaboration du modèle réactionnel sera

illustrée en se basant sur l'exemple de la mini-extudeuse pour une réaction de polymérisation de l'ɛ-caprolactone.

2.6.3.1 Calcul de la viscosité :

Les propriétés viscoélastiques durant la polymérisation de l'ɛ-caprolactone ont été modélisées en utilisant un modèle rhéologique combiné avec les lois cinétiques de la réaction (section 2.4.3). Le modèle de Yasuda-Carreau a été choisi pour le calcul de la viscosité du polymère fondu (section 2.4.4). La viscosité sera intégré au modèle global afin de prendre en compte l'influence de son évolution sur les différentes variables d'état du procédé (pression, température matière,...).

2.6.3.2 Bilan matière en monomère et en amorceur :

La modélisation de l'évolution de la réaction se fait à travers l'écriture simple du bilan matière en monomère et en amorceur. Dans le cadre de cette réaction, seul le monomère est consommé. L'amorceur sert seulement de « base » aux chaînes vivantes. De ce fait, il n'est ni consommé ni produit. L'écriture du bilan matière en amorçeur permet juste d'avoir sa dispersion le long de l'extrudeuse et d'obtenir ainsi le caractère continu du procédé.

Le bilan de masse en monomère s'écrit de la même manière qu'un bilan de masse global (Eq. 2-62) sauf que les débits circulant entre les différents réacteurs sont calculés par rapport au monomère. De plus, un terme caractérisant la consommation du monomère durant la réaction est ajouté dans le bilan. Le bilan de masse en monomère, dans les différents réacteurs de la mini-extrudeuse, est alors donné par : 1

$$\begin{cases} m^{\varepsilon} \cdot \frac{dn_{1}^{\varepsilon}}{dt} = F_{0}^{\varepsilon} - F_{1}^{d\varepsilon} - F_{1}^{r\varepsilon} + F_{2}^{r\varepsilon} - m^{\varepsilon} \cdot r_{1} \cdot V_{1} \cdot f_{1} \\ m^{\varepsilon} \cdot \frac{dn_{2}^{\varepsilon}}{dt} = F_{1}^{d\varepsilon} - F_{2}^{d\varepsilon} - F_{2}^{r\varepsilon} + F_{3}^{r\varepsilon} - m^{\varepsilon} \cdot r_{2} \cdot V_{2} \cdot f_{2} \\ m^{\varepsilon} \cdot \frac{dn_{3}^{\varepsilon}}{dt} = F_{2}^{d\varepsilon} - F_{3}^{d\varepsilon} - F_{3}^{r\varepsilon} + F_{4}^{d\varepsilon} + F^{r\varepsilon} - m^{\varepsilon} \cdot r_{3} \cdot V_{3} \cdot f_{3} \\ m^{\varepsilon} \cdot \frac{dn_{4}^{\varepsilon}}{dt} = F_{3}^{d\varepsilon} - F_{4}^{d\varepsilon} - F^{r\varepsilon} - F_{4}^{r\varepsilon} + F_{5}^{r\varepsilon} - m^{\varepsilon} \cdot r_{4} \cdot V_{4} \cdot f_{4} \end{cases}$$
Eq. 2-71
$$m^{\varepsilon} \cdot \frac{dn_{5}^{\varepsilon}}{dt} = F_{4}^{r\varepsilon} - F_{5}^{d\varepsilon} - F_{5}^{r\varepsilon} + F_{6}^{r\varepsilon} - m^{\varepsilon} \cdot r_{5} \cdot V_{5} \cdot f_{5} \\ m^{\varepsilon} \cdot \frac{dn_{6}^{\varepsilon}}{dt} = F_{5}^{d\varepsilon} - F_{6}^{d\varepsilon} - F_{6}^{r\varepsilon} + F_{7}^{r\varepsilon} - m^{\varepsilon} \cdot r_{6} \cdot V_{6} \cdot f_{6} \\ m^{\varepsilon} \cdot \frac{dn_{7}^{\varepsilon}}{dt} = F_{6}^{d\varepsilon} - F_{f}^{r\varepsilon} - F_{7}^{r\varepsilon} - m^{\varepsilon} \cdot r_{7} \cdot V_{7} \cdot f_{7} \end{cases}$$

avec m^{ε} et n_i^{ε} respectivement la masse molaire et le nombre de moles du monomère dans le réacteur *i* (*i*=1 à 7), V_i le volume du réacteur, r_i la vitesse de réaction et f_i le taux de remplissage.

De la même manière, le bilan matière de l'amorceur dans les différents réacteurs du schéma d'écoulement s'écrit :

$$\begin{cases} m^{I} \cdot \frac{dn_{1}^{I}}{dt} = F_{0}^{I} - F_{1}^{dI} - F_{1}^{rI} + F_{2}^{rI} \\ m^{I} \cdot \frac{dn_{2}^{I}}{dt} = F_{1}^{dI} - F_{2}^{dI} - F_{2}^{rI} + F_{3}^{rI} \\ m^{I} \cdot \frac{dn_{3}^{I}}{dt} = F_{2}^{dI} - F_{3}^{dI} - F_{3}^{rI} + F_{4}^{dI} + F^{PI} \\ m^{I} \cdot \frac{dn_{4}^{I}}{dt} = F_{3}^{dI} - F_{4}^{dI} - F^{PI} - F_{4}^{rI} + F_{5}^{rI} \\ m^{I} \cdot \frac{dn_{5}^{I}}{dt} = F_{4}^{rI} - F_{5}^{dI} - F_{5}^{rI} + F_{6}^{rI} \\ m^{I} \cdot \frac{dn_{6}^{I}}{dt} = F_{5}^{dI} - F_{6}^{dI} - F_{5}^{rI} + F_{7}^{rI} \\ m^{I} \cdot \frac{dn_{6}^{I}}{dt} = F_{6}^{dI} - F_{6}^{dI} - F_{7}^{rI} + F_{7}^{rI} \end{cases}$$

avec m^{i} et n_{i}^{l} sont respectivement la masse molaire et le nombre de moles de l'amorceur dans le réacteur i (i=l a 7).

Les débits relatifs au monomère et à l'amorceur (directs et reflux) sont calculés en multipliant les débits globaux par les fractions massiques relatives à chaque espèce (Eq. 2-35).

2.7. <u>CONCLUSION :</u>

La modélisation d'un procédé d'extrusion réactive a été posée dans ce chapitre. Le but de cette étude est principalement de développer un modèle dynamique global capable de prédire l'état de l'extrudeuse en fonction de la position longitudinale et du temps vis-à-vis des variables d'actions du procédé que sont la vitesse des vis, le débit d'alimentation, le rapport $[M_0]/[I_0]$ et les puissances de chauffe. A notre connaissance et jusqu'à l'instant présent aucun travail comparable n'a été réalisé sur la modélisation dynamique d'une réaction de polymérisation en extrudeuse bivis corotative. Quelques travaux traitant du comportement dynamique des extrudeuses ont été réalisés dans le domaine agroalimentaire.

La conception du modèle global repose sur une approche mixte génie des procédés et mécanique des fluides utilisant le réacteur continu parfaitement agité (RCPA) avec reflux éventuel comme élément de base du modèle. Ainsi, les différents éléments du profil de vis (pas direct, pas inverse, bloc de malaxeurs) ont pu être représentés par un simple agencement de RCPA. Dans le but de simplifier le modèle, les blocs malaxeurs ont été approchés par des vis à pas direct si l'angle de décalage et positif et par des vis inverse si l'ange est négatif. En ce qui concerne la filière à jonc, elle a été représentée par un écoulement de Poiseuille dans un tube.

Le développement du modèle global est réalisé en utilisant des résultats de la littérature concernant les différents phénomènes pertinents puis en couplant l'ensemble afin d'avoir un comportement dynamique global du procédé. Le couplage entre les sous-modèles (écoulement, transferts thermiques, réaction et rhéologie) a été établi en écrivant les bilans de masse et d'énergie au niveau de chaque RCPA et dans les parties métalliques de l'extrudeuse associées. Cette démarche de modélisation a permis de réaliser le couplage réaction/écoulement naturellement à travers l'écriture des différents bilans.

Le modèle ainsi développé permet de prédire à la fois le comportement du procédé en régime dynamique et statique ainsi que les DTS pour différentes conditions opératoires (débit

d'alimentation, vitesse de rotation des vis, rapport $[M_0]/[I_0]$ et puissances de chauffe des fourreaux).

A titre d'exemple la réaction de polymérisation en masse de l'ɛ-caprolactone en extrudeuse bivis a été choisie. Le choix s'est porté sur cette réaction car toutes les données rhéocinétiques ont été déjà déterminées dans les travaux menés par Gimenez (1999). Dans le cas de cette polymérisation, le couplage de la réaction avec le modèle thermique et d'écoulement est nécessaire car la viscosité varie fortement au cours de l'avancement de la réaction. Les simulations réalisées en régime statique et dynamique ainsi que la validation expérimentale du modèle seront présentées dans le chapitre suivant.

CHAPITRE 3 : ANALYSE ET VALIDATION DU MODELE DE SIMULATION

3.1. INTRODUCTION :

Dans ce chapitre, nous décrirons la méthodologie adoptée pour évaluer le nombre de réacteurs à mettre en série afin de représenter le schéma d'écoulement le long d'une extrudeuse bivis corotative. Cette méthodologie repose sur l'utilisation de la distribution des temps de séjour (DTS) comme moyen pour déterminer à la fois le nombre de réacteurs et leur disposition le long de l'extrudeuse. Une étude expérimentale basée sur les DTS sera présentée pour valider le modèle d'écoulement.

Cette étude sera suivie par une présentation des différents résultats de simulation réalisés avec le modèle dynamique global. Une analyse en régime statique et dynamique est présentée pour chiffrer l'influence des conditions opératoires (débit d'alimentation, vitesse de rotation des vis et le rapport $[M_0]/[I_0]$) sur le comportement des variables d'état du procédé (température, viscosité, taux de conversion,...). Enfin, une validation expérimentale du modèle global de l'extrudeuse sera illustrée afin de consolider notre approche de modélisation.

3.2. DETERMINATION DU NOMBRE DE REACTEUR :

Le schéma d'écoulement du modèle global repose sur la mise en série d'un certain nombre de réacteurs parfaitement agités. Toutefois, ce nombre n'est pas connu au départ mais on peut le fixer arbitrairement pour réaliser une simulation. On peut aussi envisager d'exploiter des résultats expérimentaux si en on dispose d'un pilote ou d'une extrudeuse industrielle. Dans cette partie, nous proposons une méthode de calcul pour la détermination du nombre de réacteur. Cette méthode est basée sur la mesure de la DTS.

3.2.1 <u>Etude experimentale :</u>

Pour illustrer la démarche, plusieurs DTS expérimentales ont été réalisées en extrudeuse bivis corotative (Leistritz 30-34) pour différentes conditions opératoires (débit d'alimentation et vitesse de rotation des vis). Une de ces DTS sera utilisée pour la

détermination du nombre de réacteurs (DTS de référence) et les autres vont servir pour la validation expérimentale du modèle d'écoulement.

Les essais ont été réalisés en utilisant le polypropylène et les DTS sont mesurées en ligne par UV-fluorescence (Nietsch et al., 1997). Environs 25 mg d'un mélange maître anthracène/PP est injecté à l'entrée de l'extrudeuse. Ce mélange caractérise le traceur utilisé pour la détection des DTS expérimentales.

Pour la mesure de la DTS, une sonde optique est disposée au niveau de la filière. Des rayons d'intensité constante sont émis par une source UV reliée à la filière grâce à une sonde optique. La lumière entrant dans l'extrudeuse est soit réfléchie par le polymère ou absorbée par le traceur (l'anthracène). Ainsi, la fluorescence émise par le traceur est recueillie par la sonde optique. L'intensité du signal donne à chaque instant la concentration en traceur de la matière en écoulement, ce qui permet d'accéder à la DTS. Le signal récupéré est transféré à l'ordinateur où les valeurs mesurées sont échantillonnées toutes les secondes.

3.2.1.1 Présentation de l'extrudeuse et du profil de vis:

Les essais ont été réalisés au Laboratoires des Matériaux Polymères et Biomatériaux (LMPB) de l'université Claude Bernard Lyon1, sous la direction de Ph. Cassagnau et d'A. Michel et en collaboration avec F. Melis. La mesure des DTS expérimentales a été réalisée pour toutes les expériences en extrudeuse chauffée à 200°C. Les caractéristiques de l'extrudeuse bivis corotative (Leistritz 30-34) utilisée sont : distance entraxe des vis C_i =30 mm, diamètre des vis D_{ext} =34 mm, longueur du fourreau L=1.2 m, L/D_{ext} = 35. Le fourreau est divisé en dix zones de longueur égale. Chaque zone est équipée d'un chauffage à résistance électrique individuelle et d'un système de refroidissement à eau afin de réguler la température de la portion du fourreau indépendamment des autres. Le profil de vis utilisé comporte des éléments à pas de vis direct, une vis à pas inverse et deux blocs malaxeurs (6 disques malaxeurs dans chaque bloc) : le premier bloc est décalé en direct avec un angle de 60° et le second est décalé en inverse avec le même angle. Le profil de vis complet est présenté sur la Figure 3-1 :



Figure 3-1 : Profil de vis utilisé

L'extrudeuse utilisée est équipée d'une filière à jonc, représentée sur la Figure 3-2. La filière comporte un capteur de pression et une sonde optique UV pour la mesure de la DTS.



Figure 3-2 : Schéma de la filière à jonc (Poulesquen, 2001)

3.2.1.2 Résultats expérimentaux :

Différentes DTS expérimentales ont été réalisées en faisant varier les conditions opératoires (variation du débit d'alimentation et de la vitesse de rotation des vis). Le but de ces essais est dans un premier temps d'étudier l'influence des conditions opératoires sur les DTS et dans un second temps d'avoir le maximum de DTS expérimentales pour la validation du modèle d'écoulement et pour l'identification du nombre de réacteur. Les courbes de DTS brutes obtenues expérimentalement sont mesurées en filière par UV fluorescence puis elles sont normalisées par une méthode de trapèze.

La Figure 3-3 présente l'effet du débit d'alimentation sur la DTS. Toutes les DTS ont été réalisées avec une vitesse de rotation fixe égale à 160 tr/min.

Les DTS obtenues montrent que l'augmentation du débit d'alimentation entraîne un décalage des distributions vers les temps courts ainsi qu'un rétrécissement de la forme de celles-ci. Les mêmes phénomènes ont été observés par différents auteurs (Gao et al., 1999 ;

Hu et al., 1999 ; Poulesquen et al., 2002). En effet, Gao et al. (1999) indiquent que le facteur déterminant de la forme de la DTS est le débit d'alimentation.



Figure 3-3 : Influence du débit sur les DTS pour N=160tr/min

D'autres DTS ont été réalisées en faisant varier la vitesse de rotation des vis pour un débit d'alimentation fixe à 5 kg/h. La Figure 3-4 montre l'influence de la vitesse des vis sur la DTS. La première remarque est que la forme de la distribution est moins influencée par la variation de la vitesse des vis.



Figure 3-4 : Influence de la vitesse des vis sur les DTS pour F₀=5kg/h

En effet, si on considère uniquement les formes des DTS obtenues en les décalant du temps de retard, on constate que celles-ci sont quasiment identiques pour les différentes vitesses de rotation (Figure 3-5). Cependant, l'augmentation de la vitesse des vis entraîne une diminution du temps de retard. Ceci est sans doute dû au fait que lorsque la vitesse de vis augmente, la partie de l'extrudeuse partiellement remplie considérée comme à l'origine principale du retard est plus faible. Ce qui induit à un retard pur plus faible.



Figure 3-5 : Forme de la DTS pour différentes vitesses de vis (F_0 =5 kg/h)

3.2.2 ETUDE DU MODELE RCPA :

3.2.2.1 Identification du nombre de réacteur :

La démarche utilisée pour identifier le nombre de réacteurs nécessaire à la représentation du schéma d'écoulement repose sur la modélisation d'une DTS expérimentale de référence par des RCPA. La Figure 3-6 décrit l'allure générale que peut avoir une DTS dans une extrudeuse bivis. Celle-ci peut être découpée en deux parties : la première partie représente le temps de retard et la seconde la forme de la DTS.



Figure 3-6 : Allure générale d'une DTS en extrudeuse bivis

Le temps de retard est dû essentiellement au transport de la matière dans les zones partiellement remplies de l'extrudeuse. Dans la littérature, ce temps est souvent caractérisé par un réacteur piston (Gao et al., 1999 ; Puaux et al., 2000). D'un autre côté, la forme de la DTS est principalement représentative des zones entièrement remplies de l'extrudeuse.

La forme de la DTS peut être représentée par une cascade de RCPA avec reflux éventuel. Cela nécessite par conséquent d'identifier le nombre de RCPA avec reflux à mettre en série (*n*), leur volume (V^{ER}) et les débits directs circulants entre les différents réacteurs (F_i^d). En ce qui concerne les débits de reflux, ces derniers s'écrivent en fonction du débit d'alimentation et des débits directs par conséquent il n'est pas nécessaire de les identifiés. Ceci est vrai, car l'étude de la DTS est effectuée en régime permanent de ce fait l'équation (Eq. 3-1) reste toujours vraie.

$$F_0 = F_i^d - F_i^r \implies F_i^r = F_i^d - F_0$$
 Eq. 3-1

Quant au temps de retard, il peut être représenté en ajoutant à la première cascade de RCPA avec reflux «J» RCPA de même volume V^{PR} jusqu'à ce qu'on arrive à représenter le temps de retard.



Forme de la DTS

Figure 3-7 : Représentation de la DTS par des RCPA

Le nombre de réacteurs pour modéliser la DTS de référence (temps de retard et forme de la DTS) sera par la suite utilisé pour représenter le schéma d'écoulement le long de l'extrudeuse dans toutes les conditions de fonctionnement.

Les autres DTS expérimentales vont être utilisées pour la validation expérimentale du modèle d'écoulement de l'extrudeuse. En effet, à partir du modèle global de l'extrudeuse on peut simuler l'injection d'un traceur et obtenir ainsi des DTS pour n'importe quelles conditions opératoires (variation du débit d'alimentation, variation de la vitesse des vis et variation du rapport $[M_0]/[I_0]$).

3.2.2.2 Modélisation de la DTS de référence :

Comme nous l'avons expliqué dans la section précédente, la modélisation de la DTS en extrudeuse nécessite de :

- Modéliser la forme de la DTS (zones entièrement remplies) : Identifier le nombre de • réacteurs (*n*), leur volume (V^{ER}) et les débits directs (F_i^d).
- Modéliser le temps de retard (zones partiellement remplies) : Identifier le nombre de • réacteurs (J) et de leur volume (V^{PR}).

Le nombre de réacteurs nécessaire pour représenter les zones pleines de l'extrudeuse peut être déterminé facilement à partir du profil de vis (Figure 3-8). En effet, les éléments restrictifs d'un profil (vis inverse, bloc malaxeur inverse) ainsi que les éléments se trouvant en amont de ces derniers sont toujours entièrement remplis. De plus, l'élément de vis situé juste avant la filière est lui aussi entièrement rempli, car la filière représente une restriction à l'écoulement de la matière.

D'après le profil de vis que nous avons utilisé, il y a cinq zones pleines (Figure 3-8) : la vis inverse, le bloc malaxeur inverse et les trois éléments à pas direct situés en amont des deux éléments restrictifs et de la filière.



Figure 3-8 : Détermination du nombre de RCPA dans les zones pleines de l'extrudeuse

Ainsi, la forme de la DTS, qui caractérise les zones entièrement remplies de l'extrudeuse, sera modélisée par une cascade de cinq réacteurs parfaitement agités avec reflux (Figure 3-9).



Figure 3-9 : Cascade de RCPA avec reflux représentant la forme de la DTS

D'après la Figure 3-9, les volumes des réacteurs n°2 et 4 (V_{inv} et V_{mlx}) caractérisent respectivement le volume de la vis inverse et du bloc malaxeur inverse. Ces deux volumes peuvent être calculés à partir des donnés géométriques du profil de vis. Cependant, il est nécessaire d'identifier le volume des réacteurs n° 1, 3 et 5 (V_1^{ER} , V_3^{ER} et V_5^{ER}). Ces derniers représentent les zones pleines situées en amont de la vis inverse, du bloc malaxeur et de la filière et dont la longueur est inconnue. Enfin, il faut identifier les débits directs (F_1^d , F_2^d , F_3^d et F_4^d) circulant entre les différents réacteurs. Connaissant le débit global d'alimentation F_0 , les débits de reflux sont directement déduits à partir des débits directs donc il est inutile de les identifiés

Comme nous l'avons expliqué, le fait que la DTS soit réalisée en régime permanent et que les zones considérées soient pleines nous permet d'écrire les équations de continuité des débits (Eq. 3-2). On obtient alors :

$$F_0 = F_1^d - F_2^r = F_2^d - F_3^r = F_3^d - F_4^r = F_4^d - F_5^r$$
 Eq. 3-2

En ce qui concerne la modélisation du temps de retard, celle-ci se fait en ajoutant des RCPA sans reflux à la cascade représentant la forme de la DTS (Eq. 3-3). Cela nécessite d'identifier le nombre de RCPA à mettre en série (J) ainsi que le volume de ces réacteurs (V^{PR}). Ce volume est supposé le même pour tous les réacteurs.

La combinaison des deux cascades de RCPA avec et sans reflux va donner l'allure globale de la DTS (temps de retard et forme de la DTS) (Figure 3-10).



Figure 3-10: Représentation de la modélisation d'une DTS par une cascade de RCPA avec et sans reflux

Ainsi, l'allure de la DTS est obtenue en simulant l'injection d'un traceur à l'entrée de la cascade (Figure 3-10). Les équations du bilan de masse du traceur sont données par :
$$\begin{cases} \rho_{m} \cdot V^{PR} \frac{dC_{1}}{dt} = F_{0} \cdot C_{in} - F_{0} \cdot C_{1} \\ \vdots \\ \rho_{m} \cdot V^{PR} \frac{dC_{j}}{dt} = F_{0} \cdot C_{j-1} - F_{0} \cdot C_{j} \\ \vdots \\ \rho_{m} \cdot V^{PR} \frac{dC_{n-6}}{dt} = F_{0} \cdot C_{n-7} - F_{0} \cdot C_{n-6} \\ \rho_{m} \cdot V^{PR} \frac{dC_{n-5}}{dt} = F_{0} \cdot C_{n-6} - F_{0} \cdot C_{n-5} \\ \rho_{m} \cdot V_{1}^{ER} \frac{dC_{n-4}}{dt} = F_{0} \cdot C_{n-5} - F_{1}^{d} \cdot C_{n-4} + (F_{1}^{d} - F_{0})C_{n-3} \\ \rho_{m} \cdot V_{1}^{ER} \frac{dC_{n-2}}{dt} = F_{1}^{d} \cdot C_{n-4} - (F_{2}^{d} + F_{1}^{d} - F_{0})C_{n-3} + (F_{2}^{d} - F_{0})C_{n-2} \\ \rho_{m} \cdot V_{3}^{ER} \frac{dC_{n-2}}{dt} = F_{2}^{d} \cdot C_{n-3} - (F_{3}^{d} + F_{2}^{d} - F_{0})C_{n-2} + (F_{3}^{d} - F_{0})C_{n-1} \\ \rho_{m} \cdot V_{3}^{ER} \frac{dC_{n-1}}{dt} = F_{3}^{d} \cdot C_{n-2} - (F_{4}^{d} + F_{3}^{d} - F_{0})C_{n-1} + (F_{4}^{d} - F_{0})C_{n} \\ \rho_{m} \cdot V_{5}^{ER} \frac{dC_{n}}{dt} = F_{4}^{d} \cdot C_{n-1} - F_{4}^{d} \cdot C_{n} \end{cases}$$

 V^{inv} , V^{mlx} sont respectivement les volumes de la vis inverse et du bloc malaxeur inverse (calculés géométriquement), V_1^{ER} , V_3^{ER} et V_5^{ER} sont les volumes des réacteurs pleins (paramètre à identifier), V^{PR} volume des réacteurs partiellement remplis (paramètre à identifier), ρ_m est la densité de la matière, F_0 le débit massique d'alimentation, F_1^d , F_2^d , F_3^d et F_4^d les débits massiques directs (paramètres à identifier), C_{in} la concentration du traceur à l'entrée et C_i la concentration du traceur dans le réacteur *i*.

Pour réduire le nombre de paramètres, on suppose les volumes V_1^{ER} , V_3^{ER} et V_5^{ER} égaux. Les paramètres à estimer sont alors le volume V^{ER} des réacteurs avec reflux (réacteurs pleins), les débits directs F_1^d , F_2^d , F_3^d , F_4^d et le volume des réacteurs partiellement remplis V^{PR} .

L'identification des paramètres du modèle de la DTS (Eq. 3-3) est faite en utilisant la fonction « *lsqcurvefit* » de Matlab[®]. Cette fonction minimise l'écart existant entre une courbe expérimentale et une courbe simulée. La fonction « *lsqcurvefit* » propose différentes

méthodes d'optimisation (Levenberg-Marquardt, Gauss-Newton,...). Le choix d'une méthode par rapport à une autre dépendra du problème d'optimisation lui-même.

Pour l'identification des différents paramètres, nous avons choisi de prendre comme DTS de référence celle réalisée avec un débit d'alimentation de 5 kg/h et une vitesse de vis de 200 *tr/min*. Les paramètres obtenus après identification sont présentés dans le Tableau 3-1 :

Paramètres	Valeur	Incertitude
$F_1^d (kg/s)$	6.98e-03	±2.68e-03
$F_2^d (kg/s)$	9.29e-03	±2.97e-03
$F_3^d (kg/s)$	9.17e-03	±3.69e-03
$F_4^d (kg/s)$	7.01e-03	±3.69e-03
$V^{ER}(m^3)$	1.51e-05	±4.57e-07
$V^{PR}(m^3)$	2.43e-06	±3.34e-08

Tableau 3-1 : Paramètres identifiés pour une DTS de référence (F0=5kg/h ; N=200tr/min)

Les valeurs des paramètres identifiés ont été obtenues avec une cascade de quarante RCPA (cinq RCPA avec reflux et trente cinq sans reflux). La représentation du temps de retard de la DTS de référence a donc nécessité l'ajout d'au moins 35 RCPA sans reflux. Le résultat de simulation de la DTS de référence est présenté dans la Figure 3-11. Celle-ci illustre la comparaison entre la DTS expérimentale et la DTS simulée avec le modèle (Eq. 3-3) pour une vitesse de vis de 200tr/min et un débit d'alimentation de 5kg/h.



Figure 3-11 : Comparaison entre la DTS simulée et la DTS expérimentale (F₀=5kg/h ;N=200tr/min)

D'après cette figure, on peut dire que le modèle développé reproduit d'une manière très satisfaisante la DTS expérimentale de référence tant au niveau de la forme que du temps de retard. Certes un léger écart existe entre le temps de retard simulé et expérimental. Ce dernier peut être réduit en augmentant le nombre de RCPA sans reflux. Cependant, nous avons choisi de fixer ce nombre à 35 afin de simplifier l'élaboration du modèle global de l'extrudeuse. En effet, l'augmentation du nombre de réacteurs impliquerait une augmentation des variables d'état dans le modèle de l'extrudeuse. Il faut alors faire un compromis entre la performance et le degré de complexité du modèle de l'extrudeuse.

Au final, le nombre de réacteurs nécessaire pour représenter le schéma d'écoulement est estimé à quarante RCPA avec reflux. Cependant, il ne faut pas perdre de vue que le but de notre étude est la modélisation d'un procédé d'extrusion réactive en extrudeuse. La modélisation de la DTS de référence ne sert que pour déterminer le nombre de réacteurs nécessaire pour la représentation des écoulements le long de l'extrudeuse.

3.2.3 <u>VALIDATION QUALITATIVE ET EXPERIMENTALE DU MODELE</u> <u>D'ECOULEMENT THEORIOUE</u>

L'étude réalisée sur la DTS de référence nous a permis d'établir le nombre total de réacteurs nécessaire à la représentation des écoulements le long du pilote de l'extrudeuse. Ce nombre a été fixé à quarante RCPA avec reflux éventuel si le réacteur est plein. L'élaboration du modèle d'écoulement présenté dans le chapitre 2 est effectuée sur la base de ce nombre de RCPA. Les spécificités au niveau des éléments restrictifs (vis inverse, bloc malaxeur inverse et la filière) tel que la jonction entre un élément de vis à pas inverse et à pas direct (calcul du débit F^P) ou le calcul du débit en filière ont été prises en compte lors de l'élaboration du modèle d'écoulement. Enfin, le taux de remplissage des réacteurs est choisi comme étant la variable d'état du modèle d'écoulement. Cette vision du modèle sera qualifiée de théorique dans cette section.

Le volume de chaque réacteur *i* peut être calculé à partir des caractéristiques géométriques de la vis et du fourreau. Il correspond au volume disponible entre le fourreau et les vis. Ce volume est donné pour un réacteur *i* par la relation suivante :

$$V_i = S_{lib}^m \cdot L_i$$
 Eq. 3-4

avec L_i est la longueur du morceau de vis et S_{lib}^m la section libre que peut occuper la matière dans le système bivis de l'extrudeuse. Elle est égale à :

$$S_{lib}^{m} = S_{F} - 2S_{V}$$
 Eq. 3-5

avec S_F la section transversale libre du fourreau et S_v la section transversale d'une vis.

Sachant que la DTS est représentative des écoulements le long de l'extrudeuse, nous avons choisi d'utiliser cette information comme moyen pour valider expérimentalement le comportement du modèle d'écoulement vis-à-vis des conditions opératoires. Cette validation est réalisée dans un premier temps sur le modèle d'écoulement théorique en intégrant dans ce dernier les paramètres physiques du polypropylène qui a été utilisé pour cette étude. La viscosité nécessaire pour le calcul des pressions donc des débits de reflux est fixée à 1000 *Pa.s.*

La simulation des DTS en utilisant le modèle d'écoulement est réalisée comme suit :

- On part d'un état initial où l'extrudeuse est vide (taux de remplissage nuls),
- On applique un débit d'alimentation et une vitesse de rotation des vis.
- On intègre le modèle jusqu'à ce qu'on estime que le régime permanent est atteint (les DTS sont toujours réalisées en régime permanent).
- On déduit les débits internes circulant entre les différents réacteurs ainsi que les volumes.
- On introduit ces débits et ces volumes dans le modèle de la DTS puis on applique une impulsion à l'entrée de l'extrudeuse pour simuler l'injection d'un traceur.
- Le signal récupéré au niveau du dernier réacteur représentera alors la DTS simulée avec la vitesse de vis et le débit d'alimentation appliqués au départ.

3.2.3.1 Influence des conditions opératoires sur la DTS calculée:

Pour valider le comportement du modèle d'écoulement vis à vis des conditions opératoires telles que la vitesse des vis ou le débit d'alimentation, nous avons simulé plusieurs DTS en appliquant la démarche présentée ci-dessus.

Nous avons commencé cette étude par l'analyse de l'influence du débit d'alimentation sur le modèle d'écoulement. Plusieurs DTS ont été simulées en faisant varier le débit d'alimentation et en gardant la vitesse des vis fixe. Les résultats de simulations sont présentés dans la Figure 3-12. A première vue, l'allure des DTS obtenues montrent que le modèle d'écoulement réagit correctement aux variations du débit d'alimentation. Lorsque le débit augmente la forme des DTS se resserre au niveau temporel. Ceci correspond aux observations faites sur les DTS expérimentales (Figure 3-3). Par contre, le point qui n'est pas vérifié est le décalage des DTS vers les temps courts lorsque le débit d'alimentation augmente. Certes, un léger décalage existe mais il n'est pas représentatif du temps de retard observé avec les DTS expérimentales.



Figure 3-12 : DTS simulées avec différents débits d'alimentation et une vitesse fixe N=160tr/min

La comparaison entre les DTS simulées et expérimentales est illustrée dans la Figure 3-13. Ces DTS ont été réalisées avec une vitesse de vis fixe à 160 tr/min et des débits d'alimentation de 3 et 5 kg/h. Cette figure montre que le temps de retard des DTS simulées est sous-estimé par rapport à celui des DTS expérimentales.

Le fait que le modèle d'écoulement sous estime le temps de retard est peut être dû à la façon dont on a modélisé les écoulements. En effet, les différents débits sont calculés en appliquant l'hypothèse que la matière est à l'état fondu, le cas d'un écoulement à l'état solide n'a pas été pris en compte. Or, les différentes DTS expérimentales ont été réalisées avec du polypropylène entrant à l'état solide dans l'extrudeuse. Ce détail peut être considéré comme une des raisons de ce problème. Ajouter à cela, l'approximation que nous avons appliqué sur les blocs malaxeurs en les approchants par des éléments à pas de vis direct ou inverse selon leur angle de décalage. Tous ces points peuvent avoir des influences sur le comportement global du modèle d'écoulement. Il est donc nécessaire de revoir certains points du modèle afin de mieux représenter le temps de retard. Toutefois, il faut noter que le modèle parvient malgré tout à reproduire la forme des DTS pour différents débits d'alimentation. Ceci indique que le modèle réagit bien au remplissage des zones pleines lorsque le débit d'alimentation varie.



Figure 3-13 : Comparaison entre les DTS simulées et expérimentales pour différents débits avec une vitesse de vis de 160 tr/min

L'autre point que nous voulions vérifier concerne l'influence de la vitesse des vis sur les DTS simulées. Ainsi, différentes DTS ont été simulées en faisant varier la vitesse des vis (N=150; 200 et 300 tr/min) avec un débit d'alimentation fixe égal à 5 kg/h. Les résultats de simulations sont illustrés dans la Figure 3-14. Ces résultats rendent compte des observations expérimentales faites sur l'influence de la vitesse des vis sur les DTS. D'après la Figure 3-14, on remarque que la variation de la vitesse n'induit pas une variation significative de la forme de la DTS. Cette influence se limite au décalage des distributions vers les temps courts lorsque la vitesse des vis augmente.



Figure 3-14 : DTS simulées avec différentes vitesses de vis pour un débit fixe F₀=5 kg/h

Cependant, même si le modèle d'écoulement caractérise correctement l'influence de la vitesse des vis sur les DTS, on constate que la confrontation entre les résultats de simulations et expérimentaux n'est pas satisfaisante. De la même manière que dans l'étude menée sur l'influence du débit, on constate que le modèle d'écoulement reproduit d'une manière satisfaisante la forme des DTS expérimentales par contre le temps de retard est toujours mal estimé. La comparaison entre les DTS simulées et expérimentales confirme ces observations (Figure 3-15).



Figure 3-15 : Comparaison entre les DTS simulées et expérimentales pour différentes vitesses

D'après les différents résultats présentés ci-dessus, on peut dire d'une manière générale que le modèle d'écoulement théorique développé à partir des données géométriques du profil de vis traduit correctement l'influence des conditions opératoires (variation de la vitesse des vis et du débit d'alimentation) sur le comportement des écoulements le long de l'extrudeuse. On arrive à partir du modèle d'écoulement à reproduire la forme des DTS pour différentes conditions opératoires. Cependant, le temps de retard est mal estimé par le modèle. Ce point constitue l'inconvénient majeur de cette modélisation.

Dans ce qui va suivre nous allons présenter une démarche afin de minimiser l'erreur entre le temps de retard réel et simulé au niveau des DTS. Cette démarche sera appliquée au modèle d'écoulement en se basant sur les valeurs des paramètres identifiés lors de la modélisation de la DTS de référence. Le but de cette démarche est d'ajuster les paramètres géométriques K^d par le calcul des débits directs, notamment dans les zones partiellement remplies qui caractérisent le temps de retard. C'est en effet dans cette zone que l'incertitude est la plus grande sur ces coefficients. Les paramètres K^r nécessaires pour le calcul des débits de reflux restent ceux donnés par les expressions théoriques obtenues à partir des données géométriques de la vis. Or, le modèle décrit correctement la forme de la DTS qui est représentative des zones pleines. Ainsi, il est inutile d'identifier ces paramètres.

3.2.3.2 Ajustement des paramètres pour le calcul des débits directs :

Pour mieux expliquer la démarche adoptée lors de l'estimation des coefficients K^d , nous avons choisi de présenter les différentes étapes de cette approche en détaillant le raisonnement sur une partie du profil de vis utilisé. La même démarche peut alors être appliquée à l'ensemble du profil. La discrétisation du profil est présentée dans la Figure 3-16.



Figure 3-16 : Discrétisation du profil de vis

L'identification du nombre de réacteurs réalisée sur la DTS de référence (F_0 = 5 kg/h et N= 200 tr/min) indique qu'il faut une quarantaine de RCPA pour représenter cette DTS. L'estimation des coefficients K^d est effectuée à partir des paramètres identifiés lors de la modélisation de la DTS de référence, notamment le volume des zones partiellement remplies (V^{PR}). Les éléments restrictifs du profil de vis et les éléments situées en amont sont supposés pleins pour les conditions opératoires appliqués (F_0 = 5 kg/h et N= 200 tr/min).

Le taux de remplissage dans chaque réacteur peut alors être calculé à partir du volume identifié dans les zones partiellement remplies (V^{PR}) selon la relation suivante :

$$f_i^t = \frac{V^{PR}}{V_i}$$
 Eq. 3-6

avec V_i^{PR} le volume identifié du réacteur *i*, V_i le volume total libre du réacteur *i*. Ce dernier est calculé géométriquement à partir de l'équation Eq. 3-4.

Les volumes libres des réacteurs n° 1 à 4 (V_1 à V_4) sont égaux. Ces réacteurs appartiennent au même élément de vis. Ils sont partiellement remplis et le volume occupé par la matière dans chaque réacteur est connu. Ce dernier correspond au volume identifié (V^{PR}). Les taux de remplissages de ces réacteurs sont par hypothèses égaux. Cette hypothèse a été posée lors de l'identification paramétrique. De là, on obtient les égalités suivantes :

$$f_1 = f_2 = f_3 = f_4 \implies \frac{V_1^{PR}}{V_1} = \frac{V_2^{PR}}{V_2} = \frac{V_3^{PR}}{V_3} = \frac{V_4^{PR}}{V_4} \implies V_1 \cdot f_1 = V_2 \cdot f_2 = V_3 \cdot f_3 = V_4 \cdot f_4 \qquad \text{Eq. 3-7}$$

Le fait qu'on soit en régime permanent et que les réacteurs n° 1 à 4 soient partiellement remplis, nous permet d'écrire :

$$F_{0}-\rho_{m}\cdot K_{1}^{d}\cdot N\cdot V_{1}\cdot f_{1}=0$$

$$\rho_{m}\cdot K_{1}^{d}\cdot N\cdot V_{1}\cdot f_{1}-\rho_{m}\cdot K_{2}^{d}\cdot N\cdot V_{2}\cdot f_{2}=0$$
Eq. 3-8
$$\rho_{m}\cdot K_{2}^{d}\cdot N\cdot V_{2}\cdot f_{2}-\rho_{m}\cdot K_{3}^{d}\cdot N\cdot V_{3}\cdot f_{3}=0$$

$$\rho_{m}\cdot K_{3}^{d}\cdot N\cdot V_{3}\cdot f_{3}-\rho_{m}\cdot K_{4}^{d}\cdot N\cdot V_{4}\cdot f_{4}=0$$

D'après les équations Eq. 3-7 et Eq. 3-8, on obtient :

$$K_{1}^{d} = K_{2}^{d} = K_{3}^{d} = K_{4}^{d} = \frac{F_{0}}{\rho_{m} \cdot N \cdot V_{1} \cdot f_{1}}$$
 Eq. 3-9

Le volume du réacteur n° 5 est différent de celui du réacteur n°4. De ce fait, le coefficient géométrique de ce réacteur se calcule comme suit :

$$\rho_m \cdot K_4^d \cdot N \cdot V_4^{g\acute{eo}} \cdot f_4 - \rho_m \cdot K_5^d \cdot N \cdot V_5^{g\acute{eo}} \cdot f_5 = 0 \implies K_5^d = \frac{\rho_m \cdot K_4^d \cdot N \cdot V_4^{g\acute{eo}} \cdot f_4}{\rho_m \cdot N \cdot V_5^{g\acute{eo}} \cdot f_5}$$
Eq. 3-10

Le calcul du coefficient K_6^d est un peu plus compliqué. En effet, si on écrit le bilan matière au niveau du réacteur n° 6 on s'aperçoit que l'expression de K_6^d dépend de la pression P_7 (Eq. 3-11). La pression P_7 est supérieure à la pression atmosphérique car le réacteur n° 7 (représente l'élément de vis situé en amont de la vis inverse) est entièrement rempli (Figure 3-16).

$$\rho_{m} \cdot K_{5}^{d} \cdot N \cdot V_{5}^{g\acute{eo}} \cdot f_{5} - \rho_{m} \cdot K_{6}^{d} \cdot N \cdot V_{6}^{g\acute{eo}} \cdot f_{6} + \frac{K_{7}^{r}}{\eta_{7}} \cdot (P_{7} - P_{0}) = 0$$

$$\Rightarrow K_{6}^{d} = \frac{\rho_{m} \cdot K_{5}^{d} \cdot N \cdot V_{5}^{geo} \cdot f_{5} + \frac{K_{7}^{r}}{\eta_{7}} \cdot (P_{7} - P_{0})}{\rho_{m} \cdot N \cdot V_{6}^{geo} \cdot f_{6}}$$
Eq. 3-11

Le coefficient K_7^r étant fixé par la géométrie, on peut calculer K_6^d si on connaît la pression P_7 . Pour cela, on écrit le bilan matière au niveau du réacteur n° 7 et 8. On obtient alors les équations suivantes :

• Bilan matière du réacteur n° 7 :

$$F_{6}^{d} - F_{7}^{d} + F_{8}^{d} - F_{7}^{r} + F^{p} = 0$$
Eq. 3-12
$$\Rightarrow \rho_{m} \cdot K_{6}^{d} \cdot N \cdot V_{6} \cdot f_{6} - \rho_{m} \cdot K_{7}^{d} \cdot N \cdot V_{7} \cdot f_{7} + \rho_{m} \cdot K_{8}^{d} \cdot N \cdot V_{8} \cdot f_{8} - \frac{K_{7}^{r}}{\eta_{7}} \cdot (P_{7} - P_{0}) + \frac{K^{p}}{\eta_{m}} \cdot (P_{8} - P_{7}) = 0$$

• Bilan matière du réacteur n° 8 :

$$F_{7}^{d} - F_{8}^{d} - F_{8}^{p} - F^{p} = 0$$
Eq. 3-13
$$\Rightarrow \rho_{m} \cdot K_{7}^{d} \cdot N \cdot V_{7} \cdot f_{7} - \rho_{m} \cdot K_{8}^{d} \cdot N \cdot V_{8} \cdot f_{8} - \frac{K_{8}^{r}}{\eta_{8}} \cdot (P_{8} - P_{0}) - \frac{K^{p}}{\eta_{m}} \cdot (P_{8} - P_{7}) = 0$$

Il faut donc exprimer les pressions P_7 et P_8 en fonction des coefficients K_6^d , K_7^d et K_8^d .

En développant les équations Eq. 3-12 et Eq. 3-13, on obtient le système d'équations suivant :

$$\begin{cases} \left(\frac{K_{7}^{r}}{\eta_{7}}+\frac{K^{p}}{\eta_{m}}\right)\cdot P_{7}-\frac{K^{p}}{\eta_{m}}\cdot P_{8}=\rho_{m}\cdot K_{6}^{d}\cdot N\cdot V_{6}\cdot f_{6}-\rho_{m}\cdot K_{7}^{d}\cdot N\cdot V_{7}^{g\acute{eo}}\cdot f_{7}+\rho_{m}\cdot K_{8}^{d}\cdot N\cdot V_{8}\cdot f_{8}+\frac{K_{7}^{r}}{\eta_{7}}\cdot P_{0}\\ -\frac{K^{p}}{\eta_{m}}P_{7}+\left(\frac{K_{8}^{r}}{\eta_{7}}+\frac{K^{p}}{\eta_{m}}\right)\cdot P_{8}=\rho_{m}\cdot K_{7}^{d}\cdot N\cdot V_{7}\cdot f_{7}-\rho_{m}\cdot K_{8}^{d}\cdot N\cdot V_{8}\cdot f_{8}+\frac{K_{8}^{r}}{\eta_{8}}\cdot P_{0} \end{cases}$$
Eq. 3-14

L'équation Eq. 3-14 peut être écrite sous la forme matricielle $A \cdot P = B$:

$$\begin{bmatrix} \frac{K^{p}}{\eta_{m}} & \left(\frac{K^{p}}{\eta_{m}} + \frac{K^{r}_{8}}{\eta_{8}}\right) \\ \left(\frac{K^{p}}{\eta_{m}} + \frac{K^{r}_{7}}{\eta_{7}}\right) & \frac{K^{p}}{\eta_{m}} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} P_{7} \\ P_{8} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \rho_{m} \cdot K_{6}^{d} \cdot N \cdot V_{6} \cdot f_{6} - \rho_{m} \cdot K_{7}^{d} \cdot N \cdot V_{7} \cdot f_{7} + \rho_{m} \cdot K_{8}^{d} \cdot N \cdot V_{8} \cdot f_{8} + \frac{K^{r}_{7}}{\eta_{7}} \cdot P_{0} \\ \rho_{m} \cdot K_{7}^{d} \cdot N \cdot V_{7} \cdot f_{7} - \rho_{m} \cdot K_{8}^{d} \cdot N \cdot V_{8} \cdot f_{8} + \frac{K^{r}_{8}}{\eta_{8}} \cdot P_{0} \end{bmatrix}$$

L'expression des pressions P_7 et P_8 en fonction des coefficients géométriques K_6^d , K_7^d et K_8^d est alors obtenue en résolvant de manière formelle le système d'équations :

$$A \cdot P = B \implies P = A^{-1} \cdot B$$
 Eq. 3-15

Comme le montre la Figure 3-16, les réacteurs n° 7 et 8 (éléments direct en amont et vis inverse) sont entièrement remplis. Or, cette étude concerne plus particulièrement les zones partiellement remplies qui caractérisent le temps de retard. De ce fait, nous avons choisi de calculer les coefficients K_i^d des zones pleines par le biais des donnés théoriques du profil de vis. Ceci permettra aussi de réduire la complexité des calculs.

Les coefficients K_7^d et K_8^d étant calculés théoriquement, il suffit alors de remplacer l'expression de P_7 (obtenue à partir de l'équation Eq. 3-15) dans l'équation Eq. 3-11 pour calculer le coefficient K_6^d .

De la même manière, en écrivant le bilan matière du réacteur n° 9, on constate que l'expression du coefficient K_9^d dépend de la pression P_8 (Eq. 3-16). L'expression de la pression P_8 est alors remplacée dans l'équation Eq. 3-16 pour pouvoir calculer le coefficient K_9^d .

$$K_9^d = \frac{K_8'}{\rho_m \cdot N \cdot V_9 \cdot f_9}$$
 Eq. 3-16

Les autres coefficients sont calculés en suivant le même raisonnement, il suffit de suive et d'appliquer la démarche présentée et expliquée ci-dessus.

3.2.3.3 Validation du modèle d'écoulement estimé

Nous avons présenté dans la section précédente la méthode utilisée pour identifier certains coefficients du modèle d'écoulement. Le but de cette démarche est de réduire le temps de retard qui est jusque là mal représenté par le modèle d'écoulement. Cette méthode est basée sur les résultats de l'identification réalisés avec une DTS expérimentale de référence $(F_0=5 \ kg/h \ et \ N=200 \ tr/min)$. Les coefficients K^d des zones partiellement remplies sont estimés puis introduits dans le modèle d'écoulement à la place des coefficients calculés selon les donnés géométriques des vis. Les paramètres K^d des zones pleines ainsi que les paramètres K^r ont été calculés à l'aide des expressions théoriques. Les résultats obtenus en intégrant les nouveaux coefficients K^d dans le modèle d'écoulement sont présentés dans la Figure 3-17.



Figure 3-17 : Validation du modèle d'écoulement sur des DTS réalisées avec différents débits (N=160 tr/min)

La Figure 3-17 illustre une confrontation entre les DTS expérimentales et celles simulées avec le modèle d'écoulement. Les DTS présentées ci-dessus ont été réalisées pour différents débits d'alimentation et une vitesse de vis fixe ($N=160 \ tr/min$). La première remarque qu'on peut faire est que le temps de retard est nettement mieux représenté avec les coefficients K^d estimés et l'allure générale des DTS est reproduite correctement. Par ailleurs, on constate que l'augmentation du débit entraîne un certain écart entre le temps de retard simulé et expérimental surtout lorsque le débit d'alimentation devient important (Figure 3-17-d). Cet écart s'explique en partie par le fait que les nouvelles valeurs de K^d ont été calculées en se basant sur les paramètres identifiés pour la représentation de la DTS de référence (Tableau 3-1). Ces derniers ont été identifiés avec un certain intervalle de confiance, on estime donc que l'écart entre le temps de retard simulé et expérimental provient essentiellement des incertitudes sur les paramètres identifiés.

La validation du modèle d'écoulement a aussi été faite sur des DTS expérimentales réalisées avec différentes vitesses de vis. Le résultat des simulations est illustré dans la Figure 3-18. Celle-ci présente une comparaison entre des DTS expérimentales et simulées en faisant varier la vitesse des vis pour un débit d'alimentation fixe ($F_0=5 \ kg/h$). Comme on peut le constater, l'allure des DTS ainsi que le temps de retard sont bien représentés par le modèle d'écoulement. Ceci indique que les coefficients K^d identifiés ont permis d'améliorer considérablement le comportement du modèle d'écoulement vis-à-vis de la variation de la vitesse des vis.



Figure 3-18 : Validation du modèle d'écoulement sur des DTS réalisées avec différentes vitesses (F₀=5kg/h)

Au final, on peut conclure que même s'il existe quelques imperfections au niveau du modèle d'écoulement, ce dernier traduit correctement l'influence des conditions opératoires sur les écoulements le long de l'extrudeuse sur une plage de variation de la vitesse des vis de 100 à 300 *tr/min* et pour un débit d'alimentation variant entre 2 et 12 kg/h. La validation du modèle d'écoulement bien qu'incomplète, a été faite à travers une étude du comportement de la DTS en extrudeuse bivis vis-à-vis des conditions opératoires. De plus, une confrontation entre les résultats de DTS simulées et expérimentales pour différentes conditions opératoires a été réalisée pour valider expérimentalement le modèle d'écoulement.

3.2.3.4 Etude de l'influence du choix de la DTS de référence :

L'identification des coefficients K^d est faite sur la base d'une DTS expérimentale de référence ($F_0=5 kg/h$ et N=200 tr/min). Le comportement du modèle d'écoulement a été en

partie régi par le choix de la DTS de référence. Ainsi, nous avons voulu savoir qu'elle était l'influence de ce choix sur le comportement du modèle d'écoulement.

Pour cela, nous avons choisi d'utiliser une autre DTS de référence ($F_0=2 kg/h$ et N=160 tr/min) puis nous avons refait les différentes étapes d'identification développées précédemment, notamment l'identification des volumes dans les zones partiellement remplie, ... etc.

Les résultats obtenus montrent que le choix de la DTS de référence affecte le comportement du modèle d'écoulements. Cette influence est visible sur les DTS simulées (Figure 3-19). On note alors une légère différence au niveau des formes ainsi qu'un léger décalage au niveau des temps de retard. Ceci peut s'expliquer par le fait que le changement de DTS de référence signifie un changement du point de fonctionnement donc une modification interne des écoulements le long de l'extrudeuse.



Figure 3-19 : Etude de l'influence de la DTS de référence sur les DTS (DTSref1 → F0=5 kg/h ;N=200 tr/min et DTSref2 → F0=2 kg/h ;N=160 tr/min)

Pour l'élaboration du modèle d'écoulement et du modèle global du procédé d'extrusion réactive, nous avons choisi d'utiliser la DTS de référence réalisée avec un débit d'alimentation de 5 kg/h et une vitesse de rotation des vis de 200 tr/min.

3.2.3.5 Influence du rapport F_{0}/N sur la DTS :

Un autre moyen pour valider le modèle d'écoulement consiste à faire des simulations en gardant le rapport du débit d'alimentation sur la vitesse des vis constant (F_0/N = constant). En effet, ce paramètre peut être considéré comme un estimateur du taux de remplissage global de l'extrudeuse (Agassant et al., 1996). D'après la littérature, les DTS réduites doivent être identiques pour le même rapport F_0/N (Kadri, 1997 ; Poulesquen, 2001).

Il existe un autre moyen pour tracer les DTS sous forme de coordonnées réduites. Le temps réduit est donné par : $\theta = t/\tau$ où τ est le temps de séjour moyen (moment d'ordre 1 par rapport à l'origine), défini par :

Les DTS réduites sont alors obtenues en multipliant la fonction de la DTS normée E(t) par le temps de séjour moyen :

$$E(\theta) = \tau \cdot E(t)$$
 Eq. 3-18

Sur la Figure 3-20, nous avons tracé les DTS réduites $E(\theta)$ en fonction du temps réduit $\theta = t/\tau$ pour les couples ($F_0=3 kg/h$, N=100 tr/min), ($F_0=6 kg/h$, N=200 tr/min) et ($F_0=9 kg/h$, N=300 tr/min) c'est-à-dire pour un rapport $F_0/N=0,030$. Nous constatons que les courbes se superposent parfaitement, ce qui est conforme aux résultats de la littérature (Kadri, 1997; Poulesquen et al., 2004b).



Figure 3-20 : DTS réduites à F0/N constant

3.2.3.6 Influence de la présence d'une réaction chimique sur la DTS :

Dans cette partie de l'étude, nous avons voulu savoir qu'elles étaient les influences de la présence d'une réaction sur les écoulements le long de l'extrudeuse. Ainsi, nous avons simulé différentes DTS dans le cas de la polymérisation de l' ε -caprolactone (voir chapitre 2) en faisant varier le rapport $[M_0]/[I_0]$ et en gardant le débit d'alimentation et la vitesse des vis constants (F_0 =3 kg/h et N=200 tr/min). Contrairement aux DTS simulées précédemment, ces DTS ont été réalisées avec le modèle complet de l'extrudeuse.

Les résultats de la simulation sont illustrés dans la Figure 3-21. D'après ces résultats, on observe que la variation du rapport $[M_0]/[I_0]$ n'a pas d'influence sur les DTS. D'autre part, l'augmentation du rapport $[M_0]/[I_0]$ implique une augmentation de la viscosité de la matière. Ceci signifie que la variation de la viscosité n'influence pas les DTS ce qui implique que le taux de remplissage est indépendant de la viscosité.

En effet, les expressions théoriques des débits directs ne font pas intervenir la viscosité. Celle-ci intervient uniquement lors du calcul des débits de reflux dans les zones pleines. Or, du moment que le régime permanent est atteint, on a le débit net qui est égal au débit d'alimentation ($F_{net} = F^d - F^r$). Ainsi, quelle que soit la valeur de la viscosité le débit net reste constant si le débit d'alimentation ne varie pas. Ceci explique d'une manière théorique pourquoi la variation de la viscosité n'influence pas les DTS.

L'influence de la cinétique de réaction donc du rapport $[M_0]/[I_0]$ sur la DTS a été étudiée par Poulesquen (2001). L'auteur a réalisé différentes DTS expérimentales en faisant varier le rapport $[M_0]/[I_0]$. Les résultats qu'il a obtenus montre que la variation du rapport $[M_0]/[I_0]$ n'a pas d'influence sur les DTS expérimentales. Ceci valide nos résultats de simulations (Figure 3-21).



Figure 3-21 : Influence de la cinétique de réaction sur la DTS (F0=3kg/h ; N=200tr/min)

3.3. <u>SIMULATION DYNAMIQUE ET STATIQUE DU PROCEDE</u> <u>D'EXTRUSION REACTIVE :</u>

Le modèle dynamique du procédé d'extrusion réactive que nous avons élaboré présente l'avantage de pouvoir simuler son comportement à la fois en régime permanent (à l'équilibre) et en régime dynamique (transitoire). En effet, la discrétisation de l'extrudeuse par des RCPA permet d'avoir en chaque point du profil de vis l'évolution spatiale et temporelle des différentes variables d'état du procédé (taux de remplissage, température matière, pression, taux de conversion, viscosité,...). Le comportement en régime stationnaire est obtenu pour des conditions opératoires fixes après un temps suffisamment long de simulation.

Dans ce qui va suivre, nous allons présenter des simulations réalisées dans le cas de la polymérisation de l' ε -caprolactone en faisant varier le débit d'alimentation, la vitesse des vis et le rapport $[M_0]/[I_0]$. Le cas des puissances de chauffe n'a pas été étudié car son influence est assez prévisible. Ce paramètre peut être considéré comme variable d'entrée du procédé. En

effet, l'augmentation de la puissance de chauffe des fourreaux entraîne une augmentation de la température matière le long de l'extrudeuse. Par conséquent, nous allons observer une accélération de la réaction et une chute de la viscosité sous l'effet de la température.

Les résultats de simulations vont être présentés en régime statique et dynamique afin d'illustrer l'influence des conditions opératoires sur l'évolution spatiale et temporelle des paramètres du procédé. Enfin, des confrontations entre les résultats de simulations et expérimentaux sont présentés afin de valider le comportement dynamique du modèle global du procédé d'extrusion réactive en machine bivis.

3.3.1 SIMULATIONS EN REGIME STATIONNAIRE :

3.3.1.1 Influence du rapport $[M_0]/[I_0]$:

Dans le but d'étudier l'influence du rapport $[M_0]/[I_0]$ sur le comportement statique du procédé, nous avons simulé l'alimentation de l'extrudeuse avec trois rapports $[M_0]/[I_0]$ (400, 700 et 950) en fixant la vitesse de vis à 100 *tr/min* et le débit d'alimentation à 3 *kg/h*.

La Figure 3-22 présente l'évolution de l'état du procédé le long des vis pour les différents rapports. La Figure 3-22.a montre l'évolution du taux de conversion le long des vis pour les différents rapports $[M_0]/[I_0]$. D'après cette figure, on observe une cinétique de réaction lente avec l'augmentation du rapport $[M_0]/[I_0]$. En effet, une augmentation du rapport $[M_0]/[I_0]$ signifie une diminution de la concentration en initiateur $[I_0]$. Or, d'après la relation qui définie la vitesse de réaction (Eq. 3-19), on constate que celle-ci dépend de la concentration en initiateur et de la température matière. D'après cette équation, la réaction devient rapide lorsque la concentration en initiateur et la température augmentent.

$$K_{app} = 1.2 \cdot 10^{16} \cdot [I_0]^{\alpha_c} \cdot exp(-E_a/RT)$$
 s⁻¹ Eq. 3-19

Les observations faites au niveau de la Figure 3-22.a sont conformes à la théorie. Toutefois, une conversion totale est néanmoins atteinte, dans ces conditions opératoires, pour n'importe quel rapport $[M_0]/[I_0]$.

D'autre part, une variation du rapport $[M_0]/[I_0]$ influence de manière significative l'évolution de la viscosité le long de l'extrudeuse (Figure 3-22.b). Ceci s'explique par le fait que la viscosité est fonction de la masse molaire moyenne en masse (Figure 3-22.d) et du taux de conversion. Le rapport $[M_0]/[I_0]$ intervient dans les expressions théoriques de ces deux grandeurs. En rapprochant la Figure 3-22.a et la Figure 3-22.d, on distingue bien deux comportements extrêmes : une réaction rapide donnant une masse molaire moyenne en masse faible ou une réaction lente avec des chaînes plus grandes.

Enfin, la Figure 3-22.c représente l'évolution de la température matière le long de l'extrudeuse pour les différents rapports $[M_0]/[I_0]$. La température augmente rapidement par transfert thermique jusqu'à atteindre la température du fourreau (435 *K*). Un léger décalage, de quelques degrés existe entre les différentes courbes sous l'action de la dissipation visqueuse. Ce phénomène est lié à l'augmentation de la viscosité avec l'augmentation du rapport $[M_0]/[I_0]$.

Cependant, on remarque un pic de température pour le rapport $[M_0]/[I_0] = 400$. Ceci est dû essentiellement à l'enthalpie de la réaction. Son effet est plus important dans les sections de vis où le taux de conversion augmente de façon significative. D'après la Figure 3-22.a, on observe que pour un rapport $[M_0]/[I_0]$ égal à 400 l'augmentation du taux de conversion est très rapide car la concentration en initiateur est importante. Ce pic devient plus faible pour les rapports 700 et 950. L'augmentation du taux de conversion dans ces deux cas est plus lente comparée à celle d'un rapport de 400 donc l'effet de l'enthalpie est moins visible.



Figure 3-22 : Evolution des paramètres du procédé le long des vis pour différents rapports $[M_0]/[I_0]$ (F₀=3 kg/h ; N=100 tr/min)

3.3.1.2 Influence de la vitesse de rotation des vis :

D'une manière générale, l'augmentation de la vitesse de rotation des vis entraîne une augmentation de la température matière par dissipation visqueuse et une diminution du temps de séjour. Ces deux effets antagonistes de la vitesse des vis rendent l'analyse de la situation plus difficile. En effet, l'augmentation de la température matière a tendance à accélérer la réaction alors que la diminution des temps de séjour a pour conséquence une conversion en sortie plus faible.

Afin d'observer l'influence de la vitesse de vis sur l'état du procédé, nous avons réalisé différentes simulations en faisant varier la vitesse des vis et en gardant un débit d'alimentation fixe à 3 kg/h et un rapport $[M_0]/[I_0]$ égal à 900.

La Figure 3-23.a représente l'évolution du taux de conversion le long de l'extrudeuse. D'après cette figure, on constate que l'évolution du taux de conversion devient moins rapide en augmentant la vitesse des vis. Ceci montre que l'effet du temps de séjour qui diminue avec l'augmentation de la vitesse des vis domine l'évolution de la réaction. L'effet de l'augmentation de la température par dissipation visqueuse est moins visible sur l'avancement de réaction. Cependant, dans tous les cas, une conversion totale est atteinte en sortie de filière.

L'évolution de la viscosité le long de l'extrudeuse est illustrée dans la Figure 3-23.b. On observe alors une chute de la viscosité avec l'augmentation de la vitesse. En effet, la viscosité est fonction de la température matière, de l'avancement de réaction et du taux de cisaillement. L'augmentation de la vitesse entraîne une augmentation de la température matière (Figure 3-23.c) par dissipation visqueuse ainsi qu'une diminution du taux de conversion. De plus, l'augmentation de la vitesse des vis fait augmenter le taux de cisaillement donc diminuer la viscosité de la matière (voir modèle rhéologique section 2.4.4 du chapitre 2). Ainsi, l'effet combiné de ces trois paramètres explique la chute de la viscosité. Cependant, à partir de la Figure 3-23.c, on remarque que l'effet de la dissipation visqueuse (augmentation de la température matière) est surtout visible en fin de vis (à partir du bloc malaxeur inverse). Ceci s'explique par le fait que le taux de conversion donc la viscosité devient plus importante à partir de cet élément. L'influence de la viscosité sur la température est moins visible pour les éléments de vis situés en amont du bloc malaxeur inverse. Ceci est dû au fait que la polymérisation dans ces régions est incomplète, la viscosité du produit reste alors faible et donc l'effet de la dissipation visqueuse est limité.

Enfin, du fait que la masse molaire moyenne en masse est fonction linéaire du taux de conversion, elle suit la même évolution que celui-ci pour un rapport $[M_0]/[I_0]$ fixe. On constate alors que l'augmentation de la vitesse a les mêmes effets sur M_W que sur le taux de conversion. D'après les résultats la simulation (Figure 3-23.d), on observe que l'évolution de la masse molaire moyenne en poids suit exactement la même allure que le taux de conversion. Néanmoins, la longueur des chaînes du polymère (M_W) est la même en sortie de filière et ce quelle que soit la vitesse de rotation des vis car la conversion en sortie est la même ainsi que le rapport $[M_0]/[I_0]$.



Figure 3-23 : Evolution des paramètres du procédé le long des vis pour différentes vitesses de vis N(F₀=3 kg/h; [M₀]/[I₀]=900)

3.3.1.3 Influence du débit d'alimentation :

L'influence du débit d'alimentation sur l'état du procédé a été étudiée pour une vitesse de vis fixe à 100 *tr/min* et un rapport $[M_0]/[I_0]$ égal à 900.

Une vue d'ensemble des différents résultats de simulations montre que l'influence du débit d'alimentation sur le procédé est faible comparée à celle du rapport $[M_0]/[I_0]$ ou de la vitesse de vis. Néanmoins, on constate que le taux de conversion croit moins vite lorsque le débit d'alimentation augmente (Figure 3-24.a). Cette influence se répercute évidemment sur la viscosité du fait que ses deux paramètres sont étroitement liés par les lois rhéocinétiques. Ainsi, d'après la Figure 3-24.b, on remarque une baisse de la viscosité qui est due à la baisse du taux de conversion.

Concernant la température matière (Figure 3-24.c), on observe globalement que l'augmentation du débit d'alimentation n'apporte pas une contribution significative à l'évolution de la température le long de l'extrudeuse. Cependant, un faible décalage de température existe pour les différents débits notamment en début de l'extrudeuse. Ceci peut s'expliquer par le fait que l'augmentation du débit entraîne une évolution lente du taux de conversion (Figure 3-24.a) donc le dégagement de chaleur par la réaction est plus faible en début de l'extrudeuse. L'effet de la chaleur dégagée apparaît plus loin le long des vis notamment au niveau du premier élément restrictif où on observe l'apparition d'un léger pic de température.

Enfin, la Figure 3-24.d illustre l'évolution de la masse molaire moyenne en masse le long de l'extrudeuse pour les différents débits d'alimentation. Pour les mêmes raisons cités cidessus, la masse moléculaire en poids suit quasiment la même évolution que le taux de conversion.



Figure 3-24 : Evolution des paramètres du procédé le long des vis pour différents débits d'alimentation F₀ (N=100 tr/min ; [M₀]/[I₀]=900)

3.3.2 <u>SIMULATIONS EN REGIME DYNAMIQUE :</u>

Nous allons dans cette section étudier le comportement dynamique du procédé vis-àvis de la variation des conditions opératoires. Pour cela, nous avons réalisé différentes simulations en appliquant des échelons sur le débit d'alimentation, la vitesse de rotation des vis et le rapport $[M_0]/[I_0]$.

Afin de limiter le nombre de figures, nous avons choisi de présenter l'évolution des différents paramètres uniquement dans certains réacteurs jugés importants (réacteurs pleins) tels que les réacteurs n° 10 et 30 qui représentent respectivement la vis inverse et le bloc malaxeur inverse. Au total, nous allons illustrer les différentes simulations sur un ensemble de cinq réacteurs : 3 réacteurs pleins (réacteur n° 10, 30 et 40) et deux réacteurs partiellement remplis (réacteurs n° 5 et 20). La disposition de ces réacteurs le long de la vis est présentée sur la Figure 3-25 :



Figure 3-25 : Disposition des réacteurs le long du profil de vis

3.3.2.1 Influence du rapport $[M_0]/[I_0]$:

Nous allons commencer cette étude par présenter le comportement dynamique du procédé d'extrusion réactive pour une variation du rapport $[M_0]/[I_0]$ appliquée en entrée de l'extrudeuse. Pour cela, nous avons simulé l'application d'un échelon du rapport $[M_0]/[I_0]$ de 400 à 800 au niveau de l'alimentation de l'extrudeuse en gardant un débit d'alimentation fixe à 3 kg/h et une vitesse des vis à 200 tr/min. Les conditions initiales de la simulation sont : $F_0=3 \text{ kg/h}$; N=200 tr/min, $T_{fourreau}=433 \text{ K}$ (160 °C) ; $T_{vis}=420 \text{ K}$ (147 °C) ; $T_{matière}=298 \text{ K}$ (25 °C lors de l'alimentation) ; $T_{ext}=305 \text{ K}$ (32 °C température du milieu extérieur) ; $f_i=0$ avec $i=1,2,\cdots,40$ (extrudeuse vide) et une puissance de chauffe égale à 8.75K W/m. L'échelon du rapport $[M_0]/[I_0]$ est appliqué à l'instant t égal à 1500 secondes.

La Figure 3-26 montre l'évolution temporelle de la température matière, fourreau et vis dans chaque réacteur (réacteur n° 5 (R5); R10; R20; R30 et R40). Comme premières observations, on constate que pour les différents réacteurs, la température des vis suit quasiment la même évolution que la température matière. Le coefficient d'échange vismatière est tel que l'équilibre thermique est toujours atteint entre ces deux milieux. Par ailleurs, on observe une chute de température au niveau du réacteur n° 5 lors de l'application de l'échelon. Cette chute est liée à la chute de la viscosité qui entraîne une diminution des dissipations visqueuses.





Figure 3-26 : Evolution temporelle de la température (matière, fourreau et vis) pour un échelon en $[M_0]/[I_0]$ de 400 à 800 à t= 1500s

Les deux figures ci-dessous (Figure 3-27 et Figure 3-28) montrent l'évolution en fonction du temps du nombre de mole d'amorceur et de monomère lors de la variation du rapport $[M_0]/[I_0]$. L'augmentation du rapport $[M_0]/[I_0]$ implique une diminution de la quantité d'amorceur, ceci explique la chute de la quantité d'amorceur dans les différents réacteurs (Figure 3-27). Cette diminution n'a pas eu lieu instantanément dans les différents réacteurs. Ceci est lié au transport de la matière le long des vis qui crée un décalage (temps de retard) entre les différents réacteurs selon leur position le long de l'extrudeuse (Figure 3-25). Par ailleurs, la quantité d'amorceur paraît plus importante dans les réacteurs n° 10, 30 et 40 car ces derniers sont entièrement remplis (éléments restrictifs).

A travers la Figure 3-28, on observe que la quantité de monomère augmente d'une manière considérable dans les réacteurs n° 5 et 10. Cette augmentation est due au fait que la réaction devient lente lorsque la concentration en initiateur diminue. De ce fait, la consommation du monomère ne se fait pas rapidement ce qui explique son accumulation au niveau des réacteurs 5 et 10. Dans les autres réacteurs, on aperçoit une légère augmentation de la quantité de monomère mais elle reste faible car le monomère est finalement consommé durant la réaction mais plus loin dans l'extrudeuse. La conversion en sortie est totale en sortie de filière.



Figure 3-27 : Evolution temporelle du nombre de mole d'amorceur pour un échelon en $[M_0]/[I_0]$ de 400 à 800 à t= 1500s



Figure 3-28 : Evolution temporelle du nombre de mole de monomère pour un échelon en $[M_0]/[I_0]$ de 400 à 800 à t= 1500s

Comme nous l'avons vu sur la Figure 3-28, l'application de l'échelon du rapport $[M_0]/[I_0]$ entraîne en augmentation importante de la quantité de monomère notamment dans les réacteurs n° 5 et 10. Cette augmentation est synonyme d'une chute du taux de conversion qui est très visible dans les réacteurs les plus proche du point d'alimentation (réacteur n°5 et 10) (Figure 3-29). Cette chute est donc due à la diminution de la concentration en initiateur qui impose une cinétique lente de la réaction.

La Figure 3-30 présente l'évolution temporelle de la masse moléculaire moyenne en poids (\overline{M}_W) dans les différents réacteurs. Sachant que \overline{M}_W est fonction du rapport $[M_0]/[I_0]$ et du taux de conversion, on peut dire que théoriquement l'augmentation du rapport $[M_0]/[I_0]$ va entraîner une augmentation de \overline{M}_W , c'est-à-dire des chaînes de polymère plus longues. Cependant, dans la Figure 3-30, on constate que l'application de l'échelon $[M_0]/[I_0]$ a entraîné une diminution de \overline{M}_W dans le réacteur n° 5. Cette diminution est causée par la chute du taux de conversion qui est importante dans ce réacteur (Figure 3-29). Dans ce cas de figure, l'effet de la chute du taux de conversion domine celui de l'augmentation du rapport $[M_0]/[I_0]$. Dans les autres réacteurs, on retrouve la tendance générale qui indique que l'augmentation du rapport $[M_0]/[I_0]$ conduit à une augmentation de \overline{M}_W malgré une légère chute du taux de conversion (réacteur n° 10 et 20).



Figure 3-29 : Evolution temporelle du taux de conversion pour un échelon en $[M_0]/[I_0]$ de 400 à 800 à t= 1500s



Enfin, sur les deux dernières figures (Figure 3-31 et Figure 3-32), on observe respectivement l'évolution de la viscosité et de la pression (dans les réacteurs pleins). Du fait que la viscosité est fonction du taux de conversion et de \overline{M}_W , on constate que l'augmentation du rapport $[M_0]/[I_0]$ conduit une augmentation de la viscosité qui est essentiellement due à l'augmentation de la taille des chaînes de polymères (\overline{M}_W). Pour la pression (Figure 3-32), il est clair que son évolution est étroitement liée à l'évolution de la viscosité. Donc, une augmentation de la viscosité va forcément impliquer une augmentation de la pression.





Figure 3-31 : Evolution temporelle de la viscosité pour un échelon en $[M_0]/[I_0]$ de 400 à 800 à t= 1500s

Figure 3-32 : Evolution temporelle de la pression dans les réacteurs pleins pour un échelon en $[M_0]/[I_0]$ de 400 à 800 à t= 1500s

3.3.2.2 Influence de la vitesse de rotation des vis :

Dans cette section nous allons analyser l'influence de la vitesse des vis sur le comportement dynamique du procédé d'extrusion réactive. Pour ce faire, une simulation a été réalisée en appliquant un échelon de vitesse de 100 à 250 tr/min à l'instant t = 1500 s. Les conditions initiales de cette simulation sont : $F_0=3 \ kg/h$; $[M_0]/[I_0] = 600$, $T_{fourreau}=433 \ K$ (160 °C) ; $T_{vis}=420 \ K (147 \ ^{\circ}C)$; $T_{matière}=298 \ K (25 \ ^{\circ}C \text{ lors de l'alimentation})$; $T_{ext}=305 \ K$ (32 °C température du milieu extérieur) ; $f_i=0$ avec $i=1,2,\cdots,40$ (extrudeuse vide) et une puissance de chauffe égale à 8.75 KW/m.

D'après la Figure 3-33, on remarque une tendance générale qui indique que l'augmentation de la vitesse des vis induit une augmentation de la température matière sous l'effet de la dissipation visqueuse (proportionnelle à N^2). De ce fait, on aperçoit une augmentation de la température fourreau et des vis qui sont directement influencé par la température matière. Cependant, dans le cas du réacteur n°5 apparaît une chut de la température avec l'augmentation de la vitesse. Cette chute est liée à la diminution du temps de séjour. En effet, l'augmentation de la vitesse entraîne une diminution du temps de résidence donc une diminution du temps de contact entre la matière et le fourreau. En même temps, cette diminution va provoquer la chute de la conversion qui se répercute sur la viscosité donc sur la température matière par le biais de la dissipation visqueuse.

D'autre part, on constate que l'évolution de la température des vis dans les zones pleines (réacteurs n°10, 30 et 40) suit pratiquement celle de la matière. Ceci est dû au fait que dans les zones pleines la surface d'échange de chaleur entre la matière et les vis est maximale. Donc, une légère augmentation (ou diminution) de la température matière va directement influencer la température des vis. Au contraire, dans les zones partiellement remplies (réacteur n° 5 et 20) la surface d'échange n'est pas maximale : la limitation de la surface d'échange n'est pas maximale : la limitation de la surface d'échange n'est pas maximale : la limitation de la surface d'échange combinée à la diminution du temps de séjour explique le fait que dans ces zones l'évolution de la température des vis est plus lente que celle de la température matière.



Figure 3-33 : Evolution temporelle de la température (matière, fourreau et vis) pour un échelon de vitesse de vis de 100 à 250 tr/min

Concernant les évolutions temporelles du nombre de mole d'amorceur et de monomère, elles sont présentées respectivement dans la Figure 3-34 et Figure 3-35. On observe sur la Figure 3-34 que l'application de l'échelon de vitesse n'affecte pas la quantité d'amorceur dans les zones pleines (réacteurs n° 10, 30 et 40). Ceci s'explique par le fait que la quantité de matière dans ces réacteurs est maximale (taux de remplissage égal à 1).

Toutefois, dans les zones partiellement remplies (réacteurs n° 5 et 20) la quantité d'amorceur diminue avec l'augmentation de la vitesse. Dans ce cas, l'augmentation de la vitesse des vis entraîne une diminution du taux de remplissage dans les zones partiellement remplies donc une décroissance de la quantité totale de la matière. Ce qui implique une diminution du nombre de mole d'initiateur.

Dans le cas du monomère, on observe une diminution de la quantité de monomère dans le réacteur n° 5 à cause de la diminution du taux de remplissage. Mais globalement, on constate que la quantité de monomère augmente lors de l'application de l'échelon de vitesse (Figure 3-35). L'augmentation de la vitesse des vis entraîne une augmentation de la température matière qui a tendance à accélérer l'avancement de la réaction. Par ailleurs, cette augmentation un autre effet qui consiste à réduire les temps de séjours. Ceci a pour conséquence de rendre l'avancement de la réaction lent. D'après les résultats de simulation, c'est l'effet du temps de séjour qui domine le comportement de la réaction.

D'un autre côté, on voit l'apparition d'un pic de monomère dans les différents réacteurs. Ce dernier est très visible dans le réacteur n° 10. Ce pic est dû à l'effet transitoire qui apparaît lors de l'application de l'échelon de vitesse. En effet, lorsqu'on augmente la vitesse des vis le temps de résidence diminue augmentant ainsi la quantité de monomère. Au même moment, il y'a l'effet de la dissipation visqueuse qui apparaît entraînant l'élévation de la température matière qui conduit à une diminution de la quantité de monomère. Cet effet antagoniste transitoire explique l'apparition du pic.



0.035 0.03 (lom) 0.025 mole de monomère R5 L=0.1m 0.02 R10 L=0.27m R20 L=0.555m R30 L=0.84m 0.015 R40 L=1.08m Nombre de 0.01 0.005 0 1400 1800 2200 2400 2600 2800 3000 1600 2000 Temps (s)

Figure 3-34 : Evolution temporelle du nombre de mole d'amorceur pour un échelon de vitesse de vis de 100 à 250 tr/min

Figure 3-35 : Evolution temporelle du nombre de mole de monomère pour un échelon de vitesse de vis de 100 à 250 tr/min

Dans le cas du taux de conversion et de la masse molaire moyenne en masse \overline{M}_W , on remarque que l'allure de leur évolution temporelle est quasiment la même (Figure 3-36 et Figure 3-37). Les équations théoriques développées dans le chapitre 2 montrent que pour un rapport $[M_0]/[I_0]$ fixe, \overline{M}_W dépend uniquement du taux de conversion et suit son évolution. Ceci explique la similitude qui apparaît dans l'évolution du taux de conversion et de \overline{M}_W . L'effet antagoniste dû à l'application d'un échelon de vitesse explique le pic observé au niveau de la Figure 3-36 et Figure 3-37.



Figure 3-36 : Evolution temporelle du taux de conversion pour un échelon de vitesse de vis de 100 à 250 tr/min



Figure 3-37 : Evolution temporelle M_W pour un échelon de vitesse de vis de 100 à 250 tr/min

Enfin, les deux dernières figures (Figure 3-38 et Figure 3-39) illustrent l'évolution de la viscosité et de la pression. On observe une chute de la viscosité qui est liée à l'augmentation de la température matière sous l'effet de la dissipation visqueuse (Figure 3-38). De plus, on voit l'apparition d'un pic transitoire au niveau de la viscosité. Ce pic s'explique par le fait qu'à l'instant où on augmente la vitesse des vis on fait augmenter instantanément la température matière qui entraîne une diminution de la viscosité. La chute instantanée de viscosité est suivie par une diminution de la température matière elle-même conduisant à une augmentation de la viscosité. Toutefois, ces deux phénomènes n'ont pas la même amplitude, ce qui se traduit par une valeur finale de la viscosité différente de la valeur initiale.

Dans la Figure 3-39, on constate l'apparition d'un pic de pression au niveau du réacteur n° 40 (filière). Ce pic peut s'expliquer par l'existence de deux effets opposés lors de

l'application de l'échelon de vitesse. Ainsi, avec l'augmentation de la vitesse des vis, la capacité de pompage de l'extrudeuse augmente proportionnellement, alors que les débits de reflux restent inchangés. Ceci crée une augmentation du débit dans la filière causant une augmentation de la pression. D'un autre côté, la viscosité diminue sous l'effet de la dissipation visqueuse entraînant une augmentation des débits de reflux. Par conséquent, le débit net diminue et s'établit au niveau du débit d'alimentation. La valeur finale de la pression est plus faible que la valeur initiale car la viscosité de la matière a chuté avec l'augmentation de la température matière (Kulshrestha et al., 1992).



Figure 3-38 : Evolution temporelle de la viscosité pour un échelon de vitesse de vis de 100 à 250 tr/min pour un échelon de vitesse de vis de 100 à 250 tr/min

Figure 3-39 : Evolution temporelle de la pression

3.3.2.3 Influence du débit d'alimentation :

Cette section sera consacrée à l'étude de l'influence du débit sur le comportement transitoire du procédé d'extrusion. Une simulation a été réalisée en appliquant un échelon de débit de 3 à 6 kg/h à l'instant t = 1500 s. Les conditions initiales de simulation sont : N=200tr/min; $[M_0]/[I_0] = 600$, $T_{fourreau} = 433 K (160 °C)$; $T_{vis} = 420 K (147 °C)$; $T_{matière} = 298 K (25)$ °C lors de l'alimentation); T_{ext} = 305 K (32 °C température du milieu extérieur); f_i =0 avec $i=1,2,\cdots,40$ (extrudeuse vide) et une puissance de chauffe égale à 8.75K W/m.

La Figure 3-40 montre que l'augmentation du débit d'alimentation provoque une chute de température au niveau du réacteur n° 5 (fourreau, vis et matière). Cette tendance est observée au niveau des premiers réacteurs de la cascade (situés à proximité du point d'alimentation). La diminution de température est liée à l'augmentation de la quantité de
matière qui injectée à la température ambiante (25° C). La différence de température entre la matière et le fourreau va provoquer cette chute. Ce phénomène a tendance à disparaître au fur et à mesure qu'on s'éloigne du point d'alimentation.

Par ailleurs, on constate une augmentation significative de la température matière au niveau du réacteur n° 10. Celle-ci est due à la chaleur dégagée par la réaction. Ce phénomène est plus visible dans les réacteurs pleins. En effet, l'augmentation du débit va augmenter le taux de remplissage dans les réacteurs partiellement remplis créant une élévation de la chaleur dégagée par la réaction (proportionnelle au taux de remplissage). Celle-ci devient moins significative avec l'avancement de la réaction. De ce fait, le phénomène devient de moins en moins visible. Toutefois, la température matière reste plus élevée que celle du fourreau à cause des dissipations visqueuses.





Figure 3-40 : Evolution temporelle de la température (matière, fourreau et vis) pour un échelon de débit d'alimentation de 3 à 6 kg/h

Dans la Figure 3-41, on observe une légère augmentation de la quantité d'amorceur dans les réacteurs partiellement remplis (réacteurs n° 5 et 20) qui est liée à l'augmentation du taux de remplissage. Dans les autres réacteurs la quantité d'amorceur n'est pas affectée car il n'y a pas eu une variation du taux de remplissage (réacteurs pleins). De la même manière, on remarque dans la Figure 3-42 une élévation du nombre de mole de monomère dans les réacteurs n° 5 et 10 ainsi que l'apparition d'un pic transitoire au niveau du réacteur n° 10. En effet, l'augmentation de la quantité de matière crée une baisse du temps de séjour donc une diminution du taux de conversion. Au même moment il y'a apparition de l'effet du dégagement de chaleur par la réaction qui implique une augmentation de la température matière (Figure 3-40). Ce deuxième phénomène a tendance à accélérer l'avancement de réaction donc à diminuer la quantité du monomère. Ainsi, l'apparition quasi instantanée de ces deux phénomènes opposés explique le pic au niveau du réacteur n° 10 (vis inverse). Par ailleurs, dans les autres réacteurs la quantité de monomère est quasiment nulle du fait de l'avancement de la réaction.



d'alimentation de 3 à 6 kg/h



Comme cela a été déjà expliqué, le fait que le rapport $[M_0]/[I_0]$ soit fixe, la masse moléculaire moyenne en poids suit la même évolution temporelle que le taux de conversion. Cette tendance est observée au niveau de la Figure 3-43 et la Figure 3-44. D'autre part, d'après la Figure 3-43, on voit que l'augmentation du débit n'affecte pas significativement le taux de conversion. Un léger pic apparaît au niveau du réacteur n° 10 qui s'explique de la même manière que dans le cas du pic en quantité de monomère.



Figure 3-43 : Evolution temporelle du taux de conversion pour un échelon de débit d'alimentation de 3 à 6 kg/h



D'après la Figure 3-45, on note l'existence d'un pic suivi d'une chute de viscosité au niveau du réacteur n°10. Ce phénomène provient directement du taux de conversion. Ceci est lié au fait que le taux de conversion et la viscosité soient couplés par les lois rhéocinétiques ceci explique donc l'influence de l'avancement de la réaction sur l'évolution de la viscosité. D'autre part, on constate que l'augmentation du débit d'alimentation crée une augmentation de la pression du fait de l'augmentation du taux de remplissage dans les zones situées en amont des zones pleines (Figure 3-46).



Figure 3-45 : Evolution temporelle de la viscosité pour un échelon de débit d'alimentation de 3 à 6 kg/h



Figure 3-46 : Evolution temporelle de la pression pour un échelon de débit d'alimentation de 3 à 6 kg/h

3.3.3 VALIDATION QUANTITATIVE DU MODELE GLOBAL :

Le but de cette partie est de valider expérimentalement et de manière quantitative le comportement transitoire du modèle global du procédé d'extrusion réactive. Pour cela, nous avons comparé la réponse expérimentale et simulée de la pression en sortie de filière à des échelons de vitesses de vis et du rapport $[M_0]/[I_0]$ appliqués en entrée du procédé.

Les essais expérimentaux ont été réalisés par Poulesquen (2001) au Laboratoire des Matériaux Polymères et Biomatériaux (LMPB-Lyon I) avec la même extrudeuse sur laquelle repose l'élaboration de notre modèle. La filière à jonc, présentée dans la Figure 3-2 a été utilisée pour ces essais. Le profil de vis utilisé par l'auteur est présenté dans le Tableau 3-2. Ce dernier est composé d'éléments de vis à pas direct et de trois blocs malaxeurs d'épaisseur 7.5 mm avec un angle de décalage positif de 30° (BM 7.5/30°). Ce profil est différent de celui que nous avons modélisé. Toutefois, nous avons choisi d'exploiter ces expériences pour la validation expérimentale du modèle car la conversion est totale en sortie de filière pour les deux expériences. Dans ce cas de figure, on peut supposer que le comportement transitoire

ainsi que la valeur de la pression en sortie de filière sont les mêmes vis-à-vis des conditions opératoires pour les deux profils. En effet, la valeur maximale de la viscosité donc de la pression est atteinte lorsque la conversion est totale (pour des conditions opératoires données). Pour réaliser les simulations, nous avons reproduit les mêmes conditions expérimentales initiales utilisées par Poulesquen (2001).

Longueur (mm)	307.5	120	45	120	120	37.5	120	120	22.5	120	67.5
Pas (mm)	20	45	BM 7.5/30°	20	30	BM 7.5/30°	45	30	BM 7.5/30°	20	30

Tableau 3-2 : Profil de vis allant de la trémie vers la filière (Poulesquen, 2001).

Dans la première expérience, l'auteur injecte une solution monomère/initiateur de rapport $[M_0]/[I_0] = 1000$ avec un débit d'alimentation de 3 kg/h, une vitesse de vis de 105 tr/min et une température fourreau de 100°C. Avec ces conditions opératoires, l'auteur constate que la conversion n'est pas totale en sortie de filière. Par contre en augmentant la vitesse des vis à 200 puis à 300 tr/min, la conversion devient totale avec une chute de pression en sortie de filière. Comme nous l'avons déjà expliqué, lz chute de la pression est liée à l'élévation de la température matière sous l'effet de la dissipation visqueuse.

La Figure 3-47 illustre l'évolution de la pression en sortie de filière et l'intensité du moteur durant cette expérience. L'auteur a prélevé des échantillons à différents moments de l'expérience pour suivre l'évolution de la conversion. Les différents taux de conversion obtenus sont indiqués au niveau de la Figure 3-47. On voit alors que la conversion devient totale pour une vitesse de vis de 300 *tr/min* et sur une partie de l'intervalle où la vitesse des vis est égale à 200 *tr/min*.



Figure 3-47 : évolution en ligne de la pression et de l'intensité moteur (Poulesquen, 2001)

De ce fait, la validation expérimentale du modèle sera faite uniquement dans le cas où la conversion est totale c'est-à-dire lors de l'augmentation de la vitesse à 200 puis à 300 tr/min. On s'intéressera plus particulièrement aux phénomènes transitoires qui apparaissent au niveau de la pression en filière à savoir l'observation d'un pic lorsqu'on applique un échelon de vitesse de vis (dans ce cas un échelon de 200 à 300tr/min) et la chute de pression causée par l'augmentation de la température matière.

La simulation a été réalisée en appliquant deux échelons de vitesse le premier de 100 à 200 *tr/min* le second de 200 à 300 *tr/min*. Les conditions initiales de la simulation sont : $F_0=3 \text{ kg/h}$; $[M_0]/[I_0] = 1000$, $T_{fourreau}= 100 \text{ °C}$; $T_{vis}= 100 \text{ °C}$; $T_{matière}= 298 \text{ K}$ (25 °C lors de l'alimentation); $T_{ext}= 305 \text{ K}$ (32 °C température du milieu extérieur) et une puissance de chauffe de 5 *KW/m*.

Le résultat de la simulation ainsi que la confrontation entre le modèle et l'expérience sont présentés dans la Figure 3-48. D'après cette figure, on voit que le modèle parvient à suivre qualitativement le comportement du procédé. On observe clairement le pic de pression qui apparaît lors de l'application de l'échelon de vitesse suivi d'une chute de pression qui est due à la diminution de la viscosité. L'explication physique du pic et de la chute de pression a déjà été donnée précédemment.

Au vue la complexité du procédé, des incertitudes qui pèsent sur un certain nombre des paramètres du modèle ainsi que les différents couplages qui ont lieu durant le procédé d'extrusion réactive, on peut dire que le modèle global représente très correctement le comportement transitoire du procédé vis-à-vis de la variation de la vitesse des vis.



Figure 3-48 : Evolution temporelle de la pression pour un échelon de vitesse de vis : comparaison entre le modèle et l'expérience

Un autre phénomène transitoire validé par le modèle est le pic de pression observé par Poulesquen (2001) lors de l'injection d'un traceur. En effet, l'auteur a signalé que la nature du traceur utilisé pour mesurer, en sortie de filière, la distribution du temps de séjour peut conduire à une instabilité transitoire du procédé. Il a observé que l'injection du traceur peut entraîner dans certain cas une variation de pression en sortie de filière.

L'auteur a utilisé différents mélanges afin d'étudier leur influence sur le procédé. Parmi ces mélanges, l'auteur a expérimenté l'injection d'un mélange composé de monomère d'ɛ-caprolactone et d'anthracène. Il a observé que l'injection de ce traceur provoque une variation de la pression en sortie de filière. Il a estimé que le traceur a modifié localement le rapport $[M_0]/[I_0]$ et donc perturbé les écoulements internes le long des vis. Il explique alors que la variation locale du rapport $[M_0]/[I_0]$ est due à l'injection du monomère qui aurait pour effet de diminuer localement le rapport $[M_0]/[I_0]$, donc de faire chuter la pression. Les essais d'injection du traceur ont été réalisés durant l'expérience présentée ci-dessus dans l'intervalle de temps où la vitesse de vis est égale 300 *tr/min*.

Pour valider ce phénomène transitoire nous avons simulé l'injection d'un traceur composé uniquement de monomère. Le temps d'injection est d'une seconde et le rapport instantané des débits alimentation/traceur est de l'ordre de 6. La Figure 3-49 montre le résultat obtenu pour cette simulation ainsi qu'une comparaison entre le modèle et l'expérience. On observe que le pic expérimental est plus important que le pic simulé toutefois le modèle prédit le comportement du procédé vis-à-vis de l'injection du traceur. La validation qualitative du modèle par rapport à ce phénomène transitoire est jugée satisfaisante.



Figure 3-49 : comparaison entre le modèle l'expérience lors de l'injection d'un traceur

Comme l'avait prévu Poulesquen (2001), ce pic est dû essentiellement au fait que le traceur (monomère) a provoqué une perturbation au niveau de la réaction qui s'est répercuté sur la viscosité donc sur l'écoulement. La Figure 3-50 illustre l'influence de l'injection du traceur sur la masse molaire moyenne en masse et sur la viscosité. Ainsi, on voit l'apparition

de pics au niveau des différents réacteurs. Ces pics sont essentiellement liés à une modification locale du rapport $[M_0]/[I_0]$.



Figure 3-50 : Influence de l'injection du traceur sur $\overline{M}w$ et la viscosité

Dans la seconde expérience, Poulesquen (2001) a étudié l'évolution de la pression en fonction du rapport $[M_0]/[I_0]$ ainsi que l'influence de ce rapport sur les DTS expérimentales. Les conditions opératoires choisies par l'auteur conduisent à une conversion totale en sortie de filière tout au long de l'expérience. La température du fourreau a été fixée à 160 °C, la vitesse des vis à 106 *tr/min* et le débit d'alimentation à 3 *kg/h*. Une variation en ligne du rapport $[M_0]/[I_0]$ est appliquée conduisant ainsi à des échelons du rapport $[M_0]/[I_0]$ de 400 à 600 puis de 600 à 800.

La Figure 3-51 illustre l'évolution en fonction du temps de la pression en sortie de filière lors de l'application des échelons du rapport $[M_0]/[I_0]$. Comme prévu, on constate que l'augmentation du rapport $[M_0]/[I_0]$ fait augmenter sensiblement la pression en sortie de filière. En effet, comme nous l'avons déjà expliqué, l'augmentation du rapport $[M_0]/[I_0]$ induit une croissance des longueurs de chaînes du polymère (augmentation de \overline{M}_W). D'un autre côté, l'augmentation de \overline{M}_W entraîne une élévation de la viscosité donc de la pression en sortie de filière.



Figure 3-51 : Evolution temporelle de la pression pour différents rapports $[M_0]/[I_0]$: comparaison entre le modèle et l'expérience

La Figure 3-51 montre une confrontation simulation/expérience. A travers cette confrontation on voit que le modèle suit correctement le profil de la pression expérimental en sortie de filière. On observe ainsi une évolution en palier de la pression avec l'augmentation du rapport $[M_0]/[I_0]$.

3.4. <u>CONCLUSION :</u>

Ce chapitre a été consacré à la validation qualitative et expérimentale du modèle complet d'un procédé d'extrusion réactive. Dans la première partie, nous avons présenté une méthode de validation du modèle d'écoulement à travers l'étude des DTS expérimentales. Appliquée à des expérimentations réalisées dans une extrudeuse pilote, cette approche a permis de reproduire les DTS expérimentales pour différents débits d'alimentations et vitesses de vis. D'autres aspects du modèle d'écoulement ont été validés à travers des conclusions trouvées dans la littérature à savoir l'influence de la viscosité sur les DTS ou bien l'influence du rapport F_0/N sur les DTS réduites. Toutefois, le modèle d'écoulement élaboré présente quelques défaillances notamment au niveau de la représentation des temps de retard. Cet

inconvénient peut être contourné en affinant la discrétisation c'est-à-dire en augmentant le nombre de RCPA.

D'autre part, la notion de DTS n'est pas assez riche pour valider le modèle global. Celle-ci donne des informations qu'en régime statique et autour d'un point de fonction bien défini (conditions opératoires fixes). De ce fait, nous avons illustré dans la seconde partie du chapitre une validation plus complète en se basant sur des expériences réalisées sur l'extrudeuse pilote du LMPB. Cette validation repose sur l'aspect quantitatif du comportement du modèle face à des variations appliquées sur les paramètres d'entrée du procédé (le rapport $[M_0]/[I_0]$, la vitesse des vis, le débit d'alimentation et la puissance de chauffe). Ainsi, différentes simulations ont été réalisées en régime stationnaire et dynamique pour différentes conditions opératoires. Les résultats obtenus montrent que les paramètres du modèle (taux de remplissage, température, taux de conversion, viscosité, pression,...) réagissent correctement aux variations appliquées en entrée que ce soit en régime statiques ou dynamique. De plus, pour consolider le comportement du modèle, des validations expérimentales ont été faites en comparant la pression expérimentale en sortie de filière à la pression simulée pour des échelons de vitesse de vis et du rapport $[M_0]/[I_0]$. Les résultats obtenus montrent que le modèle traduit correctement les phénomènes transitoires qui apparaissent lors de la variation de la vitesse des vis (pic de pression) ou du rapport $[M_0]/[I_0]$ (augmentation de la pression en pallier).

Par ailleurs, ce modèle peut être amélioré en faisant une étude plus approfondie sur le comportement thermique de l'extrudeuse. Cependant, pour aller loin dans l'analyse thermique de l'extrudeuse, il est nécessaire d'avoir un pilote bien instrumenté avec des capteurs thermiques dans les zones sensible du profil de vis (vis inverse, bloc malaxeur, filière). Ceci nous donnera plus d'information sur les écoulements ou bien sur les coefficients d'échanges de chaleur. Un autre point qu'il faut approfondir concerne les coefficients permettant le calcul des débits. Une étude plus approfondie et systématique serait nécessaire pour améliorer la description des écoulements. L'utilisation des DTS locales peut être utile afin d'améliorer encore plus la modélisation des écoulements notamment dans les blocs malaxeurs.

CHAPITRE 4 : DU MODELE DE SIMULATION AU MODELE DE COMMANDE – ANALYSES ET SIMPLIFICATIONS

4.1. INTRODUCTION

Dans les chapitres 2 et 3 de ce mémoire, nous avons présenté l'élaboration et la validation qualitative et expérimentale du modèle global d'un procédé d'extrusion réactive en machine bivis. Parmi les nombreux avantages que présente ce modèle (modèle simple, prédictif, dynamique,...), on note le fait qu'il peut être employé moyennant quelques manipulations pour l'élaboration de lois de commande. En effet, la structure du modèle permet de distinguer les différentes variables du procédé à savoir les variables d'entrée (débit d'alimentation F_0 , vitesse des vis N, le rapport $[M_0]/[I_0]$, les résistances de chauffe ϕ_i i=1...m) et les variables de sortie (viscosité en filière η_f , température matière en filière T_{fil}^m , température fourreau T_f ,...) (Figure 4-1). Ce modèle permet donc d'analyser et d'étudier le comportement du système vis-à-vis des changements appliqués en entrée et servira de modèle de validation de nos lois de commande.



Figure 4-1: Représentation des différentes variables d'entrée et de sortie

Cependant, sa complexité (non linéarités, dimension,...) ne permet pas de synthétiser directement les lois de commande. Il convient donc de chercher un modèle de commande représentatif du modèle complet non linéaire au voisinage de la plage de fonctionnement considérée.

Ce chapitre est alors consacré à l'analyse et l'étude du modèle de simulation non linéaire dans le but d'élaborer un modèle linéaire exploitable pour la synthèse d'une loi de commande (Figure 4-2). Dans un premier temps, nous présentons une analyse menée sur le modèle global non linéaire dans le but de réduire sa complexité. L'analyse du modèle portera notamment sur l'influence des vis, la conduction dans les fourreaux, la présence des zones partiellement remplies,... sur le comportement global du procédé.



Figure 4-2 : Etapes successives de la linéarisation

Dans un second temps, nous allons développer un modèle linéaire à partir du modèle de simulation non linéaire en utilisant des techniques mathématiques issues des travaux de Taylor « le modèle linéarisé tangent ». Une analyse est alors menée afin de valider le comportement du modèle linéaire autour du point de fonctionnement.

Enfin, nous introduirons le concept de l'analyse modale dans le but d'effectuer une réduction de modèle. La réduction est faite sur la base de la simulation modale. Cette technique d'analyse permet de déterminer l'influence de chaque mode sur le comportement entrées-sorties du système. Ceci permet de distinguer les modes dominants et d'éliminer en conséquence les modes dont la contribution est jugée comme faible sur le comportement du système.

4.2. <u>ANALYSE DU MODELE POUR LA COMMANDE</u>

L'objectif de cette section est de simplifier directement le modèle non linéaire complet obtenu dans le chapitre 2. Comme nous l'avons souligné dans l'introduction, l'analyse du modèle porte sur l'étude de l'influence des vis, des phénomènes de conduction de chaleur (dans le métal des fourreaux et des vis), des zones partiellement remplies, ... sur le comportement du modèle du procédé. Une comparaison entre le modèle global et le modèle réduit est alors effectuée en se basant sur l'allure générale des courbes simulées (comportement en régime dynamique) et sur l'erreur statique existante entre les deux modèles (comportement en régime permanent). Différents échelons ont été appliqués sur les variables d'entrée (débit d'alimentation F_0 , vitesse des vis N, le rapport $[M_0]/[I_0]$, la puissance des résistances de chauffe ϕ) au niveau des deux modèles (complet et réduit) afin de suivre et de comparer l'évolution temporelle des variables de sortie supposées mesurables le long de l'extrudeuse (viscosité η_f , température matière en filière T_{fl}^m , température fourreau T_f ...).

4.2.1 SIMULATION

Pour des raisons de simplicité, nous avons effectué cette étude sur le modèle de la mini-extrudeuse présenté dans le chapitre 2. Dans ce modèle, la mini-extrudeuse a été représentée par une cascade de 7 RCPA avec reflux (Figure 4-3). Toutefois, la démarche choisie pour l'analyse du modèle reste valable quelle que soit la taille du modèle de départ.



a)



b)

Figure 4-3 : a) Discrétisation de l'extrudeuse ; b) Représentation du schéma d'écoulement par des RCPA

Le profil de vis utilisé lors de cette étude est présenté dans le Tableau 4-1. Ce dernier est composé essentiellement de différents éléments de vis à pas direct et d'un élément de vis à pas inverse.

Longueur (mm)	120	120	30	30	45	60	30
Pas (mm)	60	60	45	-30	20	45	20

Tableau 4-1 : Profil de vis allant de la trémie vers la filière

Les simulations ont été réalisées avec les conditions initiales suivantes :

- L'extrudeuse est vide $(f_i=0)$;
- L'extrudeuse est alimentée avec un produit de température initiale de 300 K;
- La température des fourreaux est de 435 K ;
- La température des vis est de 430 K ;
- Le débit d'alimentation (*F*_{0eq}) est de 3 *kg/h*;
- La vitesse des vis (*Neq*) est de 100 *tr/min*;
- Le rapport $([M_0]/[I_0])_{eq}$ est de 700 ;
- La puissance des résistances de chauffe (ϕ_{eq}) est de 8.75 *KW/m*.

Les variables d'entrée et de sortie prises en compte pour réaliser les différentes simulations sont résumés dans le Tableau 4-2 :

Variables d'entrée	Variables de sortie
Débit d'alimentation F_0	Température matière au niveau de la vis inverse T_{inv}^m
Vitesse de rotation des vis N	<i>Température matière au niveau de la filière</i> T_{fil}^m
Rapport $[M_0]/[I_0]$	<i>Températures des fourreaux</i> T_i^f , $i=1,7$
Les puissances de chauffe des fourreaux ϕ_i , $i=1,7$	Viscosité de la matière au niveau de la filière η_{fil}

Tableau 4-2 : Variables d'entrée et de sorties prises en compte pour l'analyse du modèle

Ainsi, après une simulation correspondant à 2000 secondes de fonctionnement de l'extrudeuse (afin d'atteindre un régime stationnaire), plusieurs échelons sur les différentes variables d'entrées (débit d'alimentation F_0 , vitesse des vis N, rapport $[M_0]/[I_0]$ et puissances de chauffe des fourreaux ϕ) ont été appliqués que ce soit au niveau du modèle complet ou réduit. Les instants d'application et les valeurs des différents échelons sont illustrés dans le tableau ci-dessous (Tableau 4-3) :

Variable d'entrée	Instant et temps d'application de l'échelon	Valeur de l'échelon
Débit	$t = 2000 s \rightarrow t = 3999 s$	$F_0 = F_{0eq} + 0.1 F_{0eq}$
d'alimentation	$t = 4000 s \rightarrow t = 5999 s$	$F_0 = F_{0eq} - 0.1 F_{0eq}$
Vitesse des vis	$t = 6000 s \rightarrow t = 7999 s$	$N = N_{eq} + 0.1 N_{eq}$
	$t = 8000 s \rightarrow t = 9999 s$	$N = N_{eq} - 0.1 N_{eq}$
Rapport $[M_0]/[I_0]$	$t = 10000 s \rightarrow t = 11999 s$	$[M_0]/[I_0] = ([M_0]/[I_0])_{eq} + 0.1([M_0]/[I_0])_{eq}$
	$t = 12000 s \rightarrow t = 13999 s$	$[M_0]/[I_0] = ([M_0]/[I_0])_{eq} - 0.1([M_0]/[I_0])_{eq}$
Puissance de chauffe	$t = 14000 s \rightarrow t = 16999 s$	$\phi \!=\! \phi_{eq} \!+\! 0.1 \phi_{eq}$
	$t = 17000 s \rightarrow t = 20000 s$	$\phi = \phi_{eq} - 0.1\phi_{eq}$

Tableau 4-3 : Instant et temps d'application des échelons sur les variables d'entrée du procédé

Par ailleurs, la comparaison entre les variables de sortie des deux modèles (réduit et complet) est faite par rapport aux critères suivants :

- ✓ Une comparaison en régime dynamique : elle se base sur une comparaison qualitative de l'allure des courbes afin de vérifier le comportement dynamique des deux modèles.
- ✓ Une comparaison en régime statique : celle-ci est réalisée en calculant l'erreur relative moyenne (Eq. 4-1) et l'erreur absolue moyenne (Eq. 4-2) en régime stationnaire entre les variables des deux modèles.

Nous avons limité notre étude sur les variables de sortie situées en aval de la vis inverse (la vis inverse est incluse dans l'étude). En effet, dans la majorité des cas, les phénomènes importants tels que la fusion, la réaction se passent essentiellement à partir du premier élément restrictif. C'est pour cette raison que nous avons fait ce choix.

Remarque :

• L'erreur relative moyenne est donnée par la relation suivante :

$$E_{Rm} = \frac{\frac{\sum_{i=1}^{n} abs(y_{c}^{i} - y_{c}^{0})}{n} - \frac{\sum_{i=1}^{n} abs(y_{r}^{i} - y_{r}^{0})}{n}}{\sum_{i=1}^{n} abs(y_{c}^{i} - y_{c}^{0})}$$
Eq. 4-1

où y_c , y_r caractérisent respectivement une variable de sortie du modèle complet et du modèle réduit en régime stationnaire, y_c^0 , y_r^0 représente respectivement la valeur statique initiale du modèle complet et réduit (avant application de l'échelon) et *n* représente le nombre de point de mesure (ou de simulation).

• L'erreur absolue moyenne est donnée par

$$E_{Am} = \frac{\sum_{i=1}^{n} abs(y_c^{stat} - y_r^{stat})}{n}$$
Eq. 4-2

abs caractérise la valeur absolue.

4.2.1.1 Analyse du comportement thermique

La première étape de notre démarche d'analyse concerne l'étude des phénomènes thermiques et leur incidence sur le comportement du modèle global. Lors de l'élaboration du modèle global (chapitre 2), nous avons pris en compte la majorité des phénomènes thermiques existants dans un procédé d'extrusion réactive : échange thermiques matière/fourreau, matière/vis, conduction de chaleur dans le métal, dissipation visqueuse, chaleur dégagée par la réaction, ...etc. Nous allons déterminer, à travers cette étude, quels sont les phénomènes qui peuvent être négligés sans pour autant altérer le comportement dynamique et statique du modèle global initial.

Il est évident que certains phénomènes thermiques tels que les dissipations visqueuses, les échanges de chaleur matière/fourreau ou encore la chaleur dégagée par la réaction ne peuvent être négligés car ils dominent fortement l'évolution de différents paramètres du modèle global. Par ailleurs, la prise en compte des échanges de chaleurs au niveau des vis (souvent négligées dans la littérature) ou encore la conduction de chaleur dans le métal (vis et fourreaux) semblent avoir moins d'influence. Cependant, il est nécessaire d'analyser et d'étudier leur importance avant de les négliger.

Nous allons étudier dans cette section les points suivants :

- Influence de la diffusion de chaleur dans le métal des fourreaux ;
- Influence des échanges de chaleur matière/vis ;
- Influence du comportement dynamique des fourreaux.

4.2.1.1.1 Influence de la conduction de chaleur dans le métal des fourreaux

Pour mener cette étude, il suffit de mettre à zéro la conductivité thermique au niveau du bilan d'énergie de l'élément de fourreau (Eq. 4-3) associé au RCPA ($\lambda_f = 0$) puis comparer les deux modèles (avec et sans conduction) par rapport à chaque variable de sortie (supposée mesurable).

$$M_{i}^{f} \cdot C_{p}^{f} \cdot \frac{dT_{i}^{f}}{dt} = \underbrace{U_{ext} \cdot S_{ext} \cdot (T_{ext} - T_{i}^{f}) + U_{f} \cdot f_{i} \cdot S_{f} \cdot (T_{i}^{m} - T_{i}^{f}) + \phi_{i}}_{Conduction \ dans \ le \ metal}$$
Echange de chaleur Chaleur due aux
fourreau/matière résistances de chauffe
fourreau/matière résistances de chauffe
résistances de chauffe
fourreau/matière résistances de chauffe
résistances de chauffe
fourreau/matière résistances de chauffe
résistances

Différents échelons (Tableau 4-3) ont été appliqués sur les entrées des deux modèles. La Figure 4-4 met en évidence l'influence de la conduction de chaleur dans le métal des fourreaux sur l'ensemble des variables de sortie.





g) Viscosité matière (filière)

Figure 4-4 : Comparaison des variables de sortie du modèle complet et réduit ($\lambda f = 0$)

Une vue d'ensemble de la Figure 4-4 montre que la conduction de chaleur dans le métal des fourreaux influence considérablement le comportement du modèle complet. Cette influence est d'autant plus visible en régime stationnaire où l'erreur entre le modèle complet et le modèle réduit est très importante notamment dans les zones pleines (les échanges thermiques sont importants) (Tableau 4-4). Par ailleurs, on constate que cette erreur diminue au fur et à mesure qu'on avance vers la filière. Cependant, le comportement dynamique du modèle réduit suit la même évolution temporelle que celle du modèle complet pour l'ensemble des variables de sortie.

D'après les résultats de simulation, on peut affirmer que les fourreaux jouent un rôle important sur le comportement thermique du modèle, par conséquent influence l'évolution de l'ensemble des variables du procédé. L'erreur statique étant très importante, il est donc préférable de ne pas envisager de simplification au niveau des fourreaux au risque d'altérer fortement le comportement du modèle du procédé.

Variables de sortie	Erreur relative moyenne (%)	Erreur absolue moyenne
<i>Température matière</i> T_{inv}^m (<i>R</i> n° 4 : vis <i>inverse</i>)	1.30E+00	7.83E+00
<i>Température matière</i> T_{fil}^m (filière)	1.85E-01	2.06E+00
<i>Température fourreau</i> T_{inv}^f (<i>R</i> n° 4 : vis <i>inverse</i>)	2.03E+00	1.00E+01
Température fourreau T_5^f (R n° 5)	4.37E-01	1.72E+00
<i>Température fourreau</i> T_6^f (<i>R</i> n° 6)	3.63E-01	3.05E+00
<i>Température fourreau</i> T_{fil}^{f} (filière)	2.54E-01	2.31E+00
Viscosité de la matière $\eta_{_{fil}}$ (filière)	1.16E-01	7.23E+00

Tableau 4-4: Erreur statique dans le cas où $\lambda_f = 0$

4.2.1.1.2 Influence des échanges de chaleur matière/vis

Dans cette partie, nous allons analyser et étudier l'importance de la prise en compte des vis lors du développement du modèle global. Pour cela, il suffit de supprimer dans le modèle les échanges thermiques entre la matière et les vis en mettant à zéro le coefficient d'échange de chaleur matière/vis ($U_v=0$) et la conductivité thermique dans le métal des vis ($\lambda_v=0$) (Eq. 4-4).

$$Echange de chaleurvis /matière Conduction dans le métal
$$M_{i}^{v} \cdot C_{p}^{v} \cdot \frac{dT_{i}^{v}}{dt} = U_{v} \cdot f_{i} \cdot S_{v} \cdot (T_{i}^{m} - T_{i}^{v}) + \frac{\lambda_{v} \cdot S_{v}}{e_{i-1}} \cdot (T_{i-1}^{v} - T_{i}^{v}) + \frac{\lambda_{v} \cdot S_{v}}{e_{i}} \cdot (T_{i+1}^{v} - T_{i}^{v})$$
Eq. 4-4$$

Les mêmes échelons (Tableau 4-3) ont été appliqués sur l'ensemble des variables d'entrée du modèle complet et réduit. La réponse temporelle des variables de sorties des deux modèles est illustrée sur la Figure 4-5.





g) Viscosité matière (filière)

Figure 4-5 : Comparaison des variables de sortie du modèle complet et réduit ($U_v = 0$ et $\lambda_v = 0$)

Les résultats de simulation obtenus montrent que le fait de supprimer la contribution des vis au niveau des échanges thermiques n'affecte pas le comportement du modèle. A travers la Figure 4-5, on remarque que l'influence des vis sur les variables de sortie est très limitée. Le comportement dynamique du modèle réduit (sans les vis) reste identique à celui du modèle complet (avec les vis). Certes, une erreur en régime statique subsiste entre les deux modèles mais elle n'a pas de conséquence néfaste sur les différentes variables du modèle réduit (Tableau 4-5). Cette dernière est plus importante au niveau de la vis inverse (température matière et fourreau) car cet élément est entièrement remplie donc les échanges sont plus importants à ce niveau. Ainsi, le fait qu'il n'y ait pas de conduction de chaleur dans le métal des vis ne permet pas d'évacuer la chaleur, celle-ci a donc tendance à s'accumuler ce qui explique l'apparition de cet écart. A travers ces constatations, on peut conclure que le fait de négliger la contribution des vis au niveau de la modélisation n'engendre pas une influence significative sur l'évolution des différentes variables du procédé. Par conséquent, ce phénomène peut être négligé lors de la modélisation dans le but de réduire la taille et la complexité du modèle.

Variables de sortie	Erreur relative moyenne (%)	Erreur absolue moyenne
<i>Température matière</i> T_{inv}^m (<i>R</i> n° 4 : vis <i>inverse</i>)	3.13E-01	1.01E+00
<i>Température matière</i> T_{fil}^m (filière)	4.77E-02	1.01E-01
<i>Température fourreau</i> T_{inv}^f (<i>R</i> n° 4 : vis <i>inverse</i>)	1.51E-01	5.44E-01
Température fourreau T_5^f (R n° 5)	8.32E-02	4.22E-01
<i>Température fourreau</i> T_6^f (<i>R</i> n° 6)	6.24E-02	2.64E-01
Température fourreau T_{fil}^f (filière)	5.24E-02	1.67E-01
Viscosité de la matière $\eta_{_{fil}}$ (filière)	3.95E-02	3.39E-01

Tableau 4-5 : Erreur statique dans le cas où $U_v = 0$ et $\lambda_v = 0$

4.2.1.2 Analyse des zones partiellement remplies

La modélisation de l'extrudeuse bivis a été effectuée à travers l'agencement d'un certain nombre de RCPA avec reflux. Une fois le régime permanent établi, les différentes simulations réalisées montrent que certains RCPA sont entièrement remplis et d'autres partiellement remplis. Ceci caractérise une des particularités des extrudeuses bivis qui fonctionnent en n'étant que partiellement remplies.

Mise à part l'influence des zones partiellement remplies sur le temps de retard, nous avons voulu, à travers cette étude, déterminer leur effet sur le comportement global du modèle. Pour ce faire, nous avons analysé les conséquences d'un regroupement de zones partiellement remplies sur l'évolution des paramètres du modèle.

Soient deux zones partiellement remplies de longueur L_1 et L_2 correspondant à deux éléments de vis de pas Pa_1 et Pa_2 , la zone équivalente, qui caractérise le regroupement des deux zones, est obtenue en calculant (Figure 4-6) :

✓ Le pas de la zone équivalente : il est donné par la relation suivante:

$$Pa_{eq} = Pa_1 \cdot \frac{L_1}{L_1 + L_2} + Pa_2 \cdot \frac{L_2}{L_1 + L_2}$$
 Eq. 4-5

✓ La longueur de la zone équivalente : elle est égale à la somme des deux longueurs :



Figure 4-6 : Regroupement de deux zones partiellement remplies

Les simulations réalisées avec le modèle 7 RCPA, sous les conditions initiales citées précédemment, montrent que les réacteurs n° 1, 2, 5 et 6 sont partiellement remplis. Nous avons appliqué les équations Eq. 4-5 et Eq. 4-6 pour calculer les pas et les longueurs équivalents des éléments de vis caractérisant la zone de regroupement des paires de réacteurs (1, 2) et (5, 6).Cette façon de procédé permet d'obtenir un modèle réduit représenté par une série de cinq RCPA avec reflux. Le nouveau profil de vis est donné dans le Tableau 4-6 :

Longueur (mm)	240	30	30	105	30
Pas (mm)	60	45	-30	34.3	20

Tableau 4-6 : Profil de vis du modèle réduit allant de la trémie vers la filière

L'application directe de l'équation Eq. 4-5 n'a pas donné de très bons résultats en termes de précision en régime statique. L'erreur en régime permanent était relativement importante notamment au niveau de la vis inverse. Pour réduire cette erreur nous avons varié le pas de vis caractérisant le regroupement des réacteurs n° 5 et 6 d'une manière progressive jusqu'à ce l'erreur soit jugée tolérable. Par ailleurs, le pas de vis représentant le regroupement des réacteurs n° 1 et 2 a été calculé selon l'équation Eq. 4-5.

Les simulations réalisées avec le modèle complet et réduit sont présentées dans la Figure 4-7. Les échelons présentés dans le Tableau 4-3 ont été appliqués sur les variables d'entrée des deux modèles. Les différentes courbes de la Figure 4-7 représentent une comparaison entre les différentes variables de sortie des deux modèles. Ces simulations ont été réalisées en prenant en compte la contribution des fourreaux et des vis aux échanges thermiques au niveau du modèle réduit ($\lambda_f \neq 0, U_v \neq 0, \lambda_v \neq 0$). Seul l'effet du regroupement des zones partiellement remplies est prie en compte dans cette étude.





e) Viscosité matière (filière) Figure 4-7 : Comparaison des variables de sortie du modèle complet et réduit (Analyse des zones partiellement remplies)

Les différentes courbes montrent que le regroupement des zones partiellement remplies n'influence pas significativement le comportement dynamique du modèle réduit par rapport au modèle complet. Cependant, on voit l'apparition d'une erreur statique entre les variables de sortie des deux modèles (Tableau 4-7). Celle-ci est importante au niveau de la vis inverse. En effet, le fait de calculer un pas équivalent lors du regroupement modifie la valeur des coefficients géométriques nécessaires pour le calcul des débits internes. Ceci va d'une certaine manière modifier le comportement des écoulements. Cette variation interne des écoulements se répercute sur les échanges thermiques d'où l'apparition d'une erreur statique en régime permanent. Cependant, selon le degré de précision que l'on veut avoir sur le modèle, il est possible de regrouper les zones partiellement remplies dans le but de réduire la complexité du modèle.

Dans notre cas, nous avons choisi de suivre cette démarche de réduction afin de rendre le modèle le plus simple possible (réduire la taille et la complexité) pour la synthèse d'une loi de commande. Toutefois, si on veut appliquer la commande en ligne il est préférable de mener une étude plus approfondie basée sur des donnés expérimentales pour analyser la validité de cette réduction.

Variables de sortie	Erreur relative moyenne (%)	Erreur absolue moyenne
<i>Température matière</i> T_{inv}^m (<i>R</i> $n^\circ 4$: vis <i>inverse</i>)	1.60E+00	1.02E+00
<i>Température matière</i> T_{fil}^m (filière)	2.47E-01	7.54E-01
<i>Température fourreau</i> T_{inv}^f (<i>R</i> n° 4 : vis <i>inverse</i>)	1.46E+00	6.35E-01
<i>Température fourreau</i> T_{fil}^{f} <i>(filière)</i>	2.50E-01	5.21E-01
Viscosité de la matière $\eta_{_{fil}}$ (filière)	1.96E-01	2.36E+00

Tableau 4-7: Erreur statique moyenne (analyse des zones partiellement remplies)

En résumé, on peut retenir de cette étude que la réduction (simplification de certains phénomènes physiques) du modèle global non linéaire passe par deux points :

- ✓ Ne pas tenir compte des vis lors de l'élaboration du modèle.
- Regrouper les zones partiellement remplies si le degré de précision sur le modèle n'est pas trop élevé.

4.3. ELABORATION DU MODELE LINEAIRE

Le modèle de simulation établi dans le chapitre 2 est difficilement exploitable pour la synthèse d'une loi de commande, du fait de ses non-linéarités, des temps de retard, ...etc. C'est pourquoi l'objectif de cette section est d'élaborer un modèle de commande linéaire à partir du modèle non linéaire issu des lois de la mécanique des milieux continus, de la chimie et du génie des procédés.

La technique la plus utilisée pour déduire du modèle non linéaire de simulation un modèle linéaire exploitable pour la synthèse d'une loi de commande repose sur l'élaboration d'un modèle linéarisé tangent valable autour d'un point de fonctionnement. Cette technique est ancienne ; son utilisation s'est répandue de par la facilité d'analyse du comportement des systèmes linéaires.

4.3.1 MODELE LINEARISE TANGENT

Définition 4-1 : Ensemble d'équilibre d'un système commandé.

L'ensemble d'équilibre d'un système mono-entrée $\underline{\dot{x}} = f(\underline{x}, u)$ $\underline{x} \in \Re^n$; $u \in \Re$ est défini par l'ensemble des couples (état, commande) annulant le champ de vecteurs f. c'est à dire qu'il s'agit de l'ensemble des points singuliers de f.

$$E = \left\{ \underbrace{(x^e, u^e)}_{e} \in \Re^n \times \Re / f(\underline{x^e}, u^e) = 0 \right\}$$
 Eq. 4-7

Définition 4-2 : Modèle linéarisé tangent (ordre 1)

Au voisinage d'un point d'équilibre (\underline{x}^e, u^e) de E, une approximation de l'évolution du système est effectuée. En utilisant un développement en série de Taylor limité au 1^{er} ordre de la fonction non linéaire *f* et en notant les variations de l'état et de la commande autour de l'ensemble d'équilibre comme l'indique le système Eq. 4-8, le modèle linéarisé tangent est donné par l'équation d'état Eq. 4-9.

$$\begin{cases} \delta \underline{x} = \underline{x} - \underline{x}^e \\ \delta u = u - u^e \end{cases}$$
 Eq. 4-8

$$\delta \underline{\dot{x}} = \left\langle \frac{\partial f(\underline{x}, u)}{\partial \underline{x}} \right|_{\left(\underline{x}^{e}, u^{e}\right)} \delta \underline{x} + \left\langle \frac{\partial f(\underline{x}, u)}{\partial u} \right|_{\left(\underline{x}^{e}, u^{e}\right)} \delta u$$
 Eq. 4-9

4.3.2 SIMULATION

A partir de l'analyse menée sur le modèle global, nous avons opté pour l'utilisation du modèle réduit obtenu en éliminant la contribution des vis $(U_v = 0, \lambda_v = 0)$ et en regroupent les paires de réacteurs partiellement remplis (1, 2) et (5, 6). Dans cette configuration, le modèle non linéaire comprend 22 états :

Etats	Nombre d'états
Taux de remplissage	2
Température matière	5
Température fourreau	5
Nombre de mole d'initiateur	5
Nombre de mole de monomère	5

Tableau 4-8 : Variables d'états du modèle non linéaire réduit

Remarque : autour du point de fonctionnement les réacteurs 2, 3 (vis inverse) et 5 (filière) sont pleins. Ceci signifie que les taux de remplissage sont égaux à 1 donc il n'y a aucun comportement dynamique au niveau de ces réacteurs $(\frac{d f_{2,3,5}}{d t}=0)$.

Nous avons choisi arbitrairement de prendre comme point d'équilibre celui obtenu pour les entrées suivantes (fonctionnement nominal de l'extrudeuse):

- Débit d'alimentation $F_{0eq} = 3 kg/h$;
- Vitesse de rotation des vis $N_{eq} = 100 tr/min$;
- Rapport $([M_0]/[I_0])_{eq} = 700$;
- Puissance des résistances de chauffe (ϕ_{ea}) est de 8.75 *KW/m*.

A cause de la complexité des calculs, nous avons préféré calculer le point d'équilibre par simulation au lieu d'utiliser la méthode classique (Eq. 4-7). Pour ce faire, nous avons réalisé une simulation sur un temps assez important (10000s) afin d'obtenir le régime permanent. Une fois ce régime atteint, les valeurs des états vont caractériser le point d'équilibre obtenu pour les valeurs des entrées citées ci-dessus.

L'obtention du modèle linéaire est réalisée en utilisant la fonction «*linmod* » du logiciel de simulation Matlab Simulink[®]. Celle-ci est définie comme suit :

$$[A,B,C,D] = linmod ('sys', x_{eq}, u_{eq})$$
Eq. 4-10

où *sys* correspond au modèle non linéaire défini sous Simulink, x_{eq} représente l'état d'équilibre, u_{eq} les entrées du système et [A, B, C, D] caractérisent les matrices d'état du système après linéarisation.

Les valeurs propres du système linéaire obtenu sont :

-2.5750 + 0.2096i	;	-0.2877
-2.5750 - 0.2096i	;	-0.2388
-1.6650	;	-0.1875
-1.2344	;	-0.0562
-1.0907	;	-0.0465
-0.7790	•	-0.0490
-0.6998	;	-0.0279
-0.4335	•	-0.0144
-0.4023	•	-0.0108
-0.1596 + 0.1892i	•	-0.0024
-0.1596 - 0.1892i	;	-0.0032

4.3.2.1 Validation du modèle linéarisé tangent

La validation du modèle linéarisé tangent passe par une comparaison entre le modèle non linéaire et le modèle linéaire autour du point de fonctionnement choisi. Cette comparaison s'effectue à la fois sur le comportement statique et dynamique des deux modèles en évaluant qualitativement les courbes simulées et en calculant l'erreur relative moyenne et l'erreur absolue moyenne entre les différentes variables des modèles non linéaire et linéaire en régime stationnaire. Pour ce faire, différents échelons, variant de 10% autour de leur valeur d'équilibre, ont été appliqués sur les variables d'entrée des deux modèles (vitesse des vis *N*, débit d'alimentation F_0 , le rapport $[M_0]/[I_0]$, et les puissances de chauffe des fourreaux ϕ_i i=1...5).

Remarque : Pour les différentes simulations réalisées, les échelons ont été appliqués après un temps de simulation de 100 secondes.

4.3.2.1.1 Variation de la vitesse des vis

Un échelon positif de 10% de la valeur d'équilibre ($N_{eq} = 100 \ tr/min$) est appliqué en entrée du modèle linéaire et non linéaire. L'évolution temporelle des variables de sortie pour les deux modèles est illustrée dans la Figure 4-8.



Figure 4-8: Comparaison des variables de sortie du modèle non linéaire et linéaire pour une variation de la vitesse des vis

Nous observons sur la Figure 4-8 que le comportement dynamique du modèle linéaire suit correctement celui du modèle non linéaire. L'effet de la variation de la vitesse des vis est parfaitement reproduit par le modèle linéaire. Concernant le comportement en régime stationnaire, les différentes courbes de la Figure 4-8 montrent l'apparition d'un très faible écart statique entre les deux modèles de l'ordre de 1%. Le Tableau 4-9 illustre les valeurs des erreurs moyennes (relative et absolue) pour les différentes variables de sortie. Ces résultats montrent que les erreurs en régime statiques sont tolérables et en conséquence considérer que le modèle linéaire est valable pour une variation de la vitesse des vis autour de 10% de sa valeur d'équilibre.

Variables de sortie	Erreur relative moyenne (%)	Erreur absolue moyenne
<i>Température matière</i> T_{inv}^m (<i>R</i> n° 3 : vis <i>inverse</i>)	1.34E-02	5.33E-02
<i>Température matière</i> T_{fil}^m (filière)	1.12E-02	2.07E-02
<i>Température fourreau</i> T_{inv}^{f} (<i>R</i> n° 3: inv)	1.45E-02	3.17E-02
<i>Température fourreau</i> T_4^f (<i>R</i> $n^\circ 4$)	9.82E-03	1.21E-02
<i>Température fourreau</i> T_{fil}^{f} (filière)	1.07E-02	1.43E-02
Viscosité de la matière $\eta_{_{fil}}$ (filière)	1.91E-02	2.05E-01

Tableau 4-9: Erreurs statiques entre le modèle non linéaire et linéaire pour une variation de la vitesse

4.3.2.1.2 Variation du débit d'alimentation

L'effet du débit d'alimentation sur le comportement du modèle est étudié en comparant les réponses des modèles linéaire et non linéaire à un échelon d'entrée. Pour cela, un échelon positif de 10% de la valeur d'équilibre ($F_{0eq} = 3 \ kg/h$) est appliqué en entrée des deux modèles. Les différents résultats de la simulation sont représentés sur la Figure 4-9.



Figure 4-9: Comparaison des variables de sortie du modèle non linéaire et linéaire pour une variation du débit d'alimentation

On peut constater sur cette figure, que le comportement dynamique du modèle non linéaire est correctement reproduit par le modèle linéaire pour une variation du débit
d'alimentation. Les différents pics transitoires, qui apparaissent lors de l'application de l'échelon, sont reproduits par le modèle linéaire. Cependant, on observe un grand écart statique en régime permanent allant jusqu'à 22% de la valeur stationnaire du modèle non linéaire (dans le cas de la température matière en filière) (voir Tableau 4-10).

Ces résultats montrent que les performances du modèle linéaire vis-à-vis de la variation du débit d'alimentation ne sont pas satisfaisantes. Pour ce cas, on constate que la fonction «*linmod* » de **Matlab Simulink**[©] ne permet pas d'obtenir un modèle linéaire acceptable sur l'ensemble de la plage de variation autour du point d'équilibre. Ceci peut s'expliquer par la complexité du modèle non linéaire (fortement non linéaire) et de la présence des équations algébriques pour le calcul des pressions (système algébro-différentiel). Par ailleurs, cet écart statique peut être compensé lors de la synthèse de la loi de commande en ajoutant une pré-commande qui prendra en compte la présence de cet écart.

Variables de sortie	Erreur relative moyenne (%)	Erreur absolue moyenne
Température matière T_{inv}^m (R n° 3 : vis inverse)	1.51E-01	1.88E-01
<i>Température matière</i> T_{fil}^m <i>(filière)</i>	2.20E-01	5.48E-02
Température fourreau T_{inv}^f (R n° 3: vis inverse)	1.39E-01	9.74E-02
Température fourreau T_4^f (R n° 4)	1.73E-01	4.92E-02
<i>Température fourreau</i> T_{fil}^f (filière)	1.95E-01	4.53E-02
Viscosité de la matière $\eta_{_{fil}}$ (filière)	2.80E-03	3.81E-03

 Tableau 4-10: Erreurs statiques moyenne entre le modèle non linéaire et linéaire pour une variation du débit d'alimentation

4.3.2.1.3 Variation du rapport $[M_0]/[I_0]$

Dans cette section, nous avons appliqué un échelon positif de 10% de la valeur d'équilibre $(([M_0]/[I_0])_{eq} = 700)$ en entrée de chaque modèle (linéaire et non linéaire) pour valider le comportement du modèle linéaire vis-à-vis de cette variable d'entrée. La réponse des variables de sorties par rapport à cette excitation est représentée sur les différentes courbes de la Figure 4-10.



Figure 4-10: Comparaison des variables de sortie du modèle non linéaire et linéaire pour une variation du rapport $[M_0]/[I_0]$

Les courbes représentées sur la Figure 4-10 montrent que la tendance concernant l'évolution temporelle des variables de sortie entre le modèle linéaire et non linéaire est respectée. L'erreur statique entre les différentes variables de sortie des deux modèles est relativement faible (Tableau 4-11) variant entre 2 et 4% de la valeur stationnaire du modèle non linéaire (cas des températures). Pour la viscosité, l'erreur est un peu plus importante, elle est estimée à environ 8%. Les mêmes commentaires avancés dans le cas précédent (variation du débit d'alimentation) peuvent être repris dans cette section pour expliquer la présence de cette erreur, à savoir la complexité du modèle et la présence des équations algébriques pour le calcul des pressions qui rendent la linéarisation par la voie de la fonction «*linmod* » de **Matlab Simulink[®]** très complexe.

Variables de sortie	Erreur relative moyenne (%)	Erreur absolue moyenne
Température matière T_{inv}^m (R n° 3 : vis inverse)	4.04E-02	1.65E-01
Température matière T_{fil}^m (filière)	2.36E-02	4.71E-02
Température fourreau T_{inv}^f (R n° 3: vis inverse)	3.89E-02	8.74E-02
Température fourreau T_4^f (R n° 4)	3.37E-02	4.49E-02
<i>Température fourreau</i> T_{fil}^f (filière)	2.76E-02	4.00E-02
Viscosité de la matière η_{fil} (filière)	8.10E-02	7.52E+00

Tableau 4-11: Erreurs statiques entre le modèle non linéaire et linéaire pour une variation du rapport $[M_0]/[I_0]$

4.3.2.1.4 Variation de la puissance de chauffe

Un échelon positif de 10 % de la valeur d'équilibre ($\phi_{eq} = 8.75 \ KW/m$) est appliqué sur l'ensemble des puissances de chauffe des fourreaux ϕ_i (i=1...5) du modèle non linéaire et linéaire. Le résultat de la simulation est représenté dans la Figure 4-11.



Figure 4-11: Comparaison des variables de sortie du modèle non linéaire et linéaire pour une variation de la puissance de chauffe

Les différentes courbes de la Figure 4-11 montrent que le modèle linéaire adopte correctement l'évolution du modèle non linéaire par rapport à une variation de la puissance de chauffe des fourreaux. L'augmentation de la puissance de chauffe induit automatiquement une augmentation de la température matière et fourreaux et par conséquent une diminution de la viscosité sous l'effet thermique. Cet aspect est donc parfaitement reproduit par le modèle linéaire.

Le comportement du modèle linéaire en régime permanent est lui aussi satisfaisant. Le Tableau 4-12 montre que les erreurs statiques moyennes (relatives et absolues) entre les deux modèles sont faibles sur l'ensemble des paramètres de sortie. Ceci valide le comportement du modèle linéaire par rapport à une variation de 10% autour de la valeur d'équilibre de la puissance de chauffe.

Variables de sortie	Erreur relative moyenne (%)	Erreur absolue moyenne
Température matière T_{inv}^m (R n° 3 : vis inverse)	4.13E-02	4.33E-01
<i>Température matière</i> T_{fil}^m <i>(filière)</i>	2.89E-03	3.93E-02
Température fourreau T_{inv}^f (R n° 3: vis inverse)	1.97E-02	2.56E-01
Température fourreau T_4^f (R n° 4)	5.93E-03	8.55E-02
<i>Température fourreau</i> T_{fil}^f (filière)	3.25E-03	4.65E-02
Viscosité de la matière $\eta_{_{fil}}$ (filière)	2.96E-02	2.02E+00

Tableau 4-12: Erreurs statiques entre le modèle non linéaire et linéaire pour une variation de la
puissance de chauffe

Ce qu'on peut retenir de cette étude est que le modèle linéaire représente d'une manière satisfaisante le comportement du modèle non linéaire pour l'ensemble des variations appliquées en entrée avec 10% de la valeur d'équilibre. Dans certain cas, notamment la variation du débit d'alimentation, un écart statique important est observé. Cependant, afin d'élaborer la loi de commande, nous allons supposer que le modèle linéaire reste valable autour du point de fonctionnement par rapport à cette variable. Par ailleurs les écarts statiques observés seront pris en compte lors de l'élaboration de la loi de commande.

4.4. COMMANDABILITE ET OBSERVABILITE

Cette section est consacrée à l'étude de deux concepts fondamentaux dans l'analyse des modèles d'état : la *commandabilité* et l'*observabilité*. Dans ce qui suit, nous allons donner quelques définitions fondamentales concernant ces deux concepts qui seront suivies d'une application sur le modèle linéaire obtenu.

On considère un système défini par :

$$\begin{aligned} (\dot{x}(t) = Ax(t) + Bu(t) \\ y(t) = Cx(t) \end{aligned}$$
 Eq. 4-11

4.4.1 <u>COMMANDABILITE</u>

Définition 4-3 : la définition de la commandabilité est donnée par :

✓ L'état *x* d'un système linéaire est dit *commandable* à un instant donné t_0 s'il existe une entrée u(t) qui permet de transférer l'état initial $x(t_0)$ à l'origine en un temps fini

 $t_1 \leq t_0$

- ✓ Un système est commandable à l'instant t_0 si tous ses états sont commandables à l'instant t_0 .
- \checkmark Un système est totalement commandable si tous ses états sont commandables pour tout instant *t*.

Critère de commandabilité :

Historiquement, l'évaluation de la commandabilité entrées/sorties a débuté dans les années 60. Par exemple le critère de Kalman établit qu'un système est *commandable* si sa matrice de commandabilité définie par $Q_c = [B \ AB \ A^2B \ \cdots \ A^{n-1}B]$ est de rang *n* (*n* est la dimension de l'espace d'état). De même, le critère de Popov/Belevitch et Hautus stipule qu'un

système est commandable si, pour toutes ses valeurs propres λ , la matrice $[\lambda I - AB]$ est de rang *n*. Enfin, le critère des Grammiens statue qu'un système stable est *commandable* si son Grammien de commandabilité, défini par $W_c = \sum_{0}^{\infty} e^{(At)} BB^T e^{A^T t} dt$, est définie positif. Ce Grammien correspond à l'influence, d'un point de vue énergétique, des entrées sur les états.

En utilisant le critère de Kalman pour étudier la commandabilité du modèle linéaire, on trouve que le rang de la matrice de commandabilité $Q_c = \begin{bmatrix} B & AB & A^2B \cdots & A^{n-1}B \end{bmatrix}$ est égal à l'ordre du système c'est-à-dire 22. Ceci signifie que le modèle linéaire est *commandable*.

4.4.2 **Observabilite**

Définition 4-4 :

Par définition, on dit qu'un système est *observable* à un instant t_1 , si la connaissance du signal d'entrée et du signal de sortie sur un intervalle de temps $[t_1, t_2]$ permet de calculer l'état du système à l'instant t_1 .

Si un système est observable quel que soit l'instant t_1 , il est dit *complètement observable*.

Critère d'observabilité :

Le système Eq. 4-11 est complètement observable si et seulement si les vecteurs lignes *C*, *CA*, *CA*², …, *CA*^{*n*-1} sont linéairement indépendants.

Cet énoncé peut se traduire également de la manière suivante : on définit la matrice d'observabilité Q_0 par la matrice formée des *n* vecteurs lignes *C*, *CA*, *CA*², ..., *CA*^{*n*-1} :

Dans le cas de notre système linéaire, la matrice d'observabilité Q_0 est de rang plein. Ceci signifie que le système est complètement observable.

4.5. ANALYSE MODALE

Nous allons présenter dans cette section la décomposition modale d'un système et les techniques d'analyse qui lui sont attachées. Une fois les notations utilisées seront définies, les concepts de mode et de structure propre seront définis, puis suivront les relations, en terme de valeurs et vecteurs propres, existant entre les entrées, les sorties et les modes du système. Cette section a été développée en reprenant les définitions énoncées dans (Magni et al., 1990).

4.5.1 <u>A propos de structure propre ...</u>

4.5.1.1 Notations

Système considéré : Considérons le système linéaire multivariable suivant :

$$\begin{cases} \dot{x} = Ax + B u \\ y = Cx + D u \end{cases}$$
 Eq. 4-12

où x est le vecteur d'états, u le vecteur des entrées et y le vecteur des sorties. Nous considérons par la suite que les dimensions du système sont les suivantes :

n états	$x \in \Re^n$
<i>m</i> entrées	$u \in \mathfrak{R}^m$
p sorties	$y \in \Re^p$

La matrice de transfert équivalente sera notée G(s) :

$$G(s) = C(sI - A)^{-1}B + D$$

La *Structure propre* du système naturel (boucle ouverte) est définie par : les *valeurs propres* de la matrice *A* notées :

$$\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n$$

Les vecteurs propres à gauche de la matrice A

$$u_1, u_2, \dots, u_n$$

Notations Matricielles : Soient q vecteurs (généralement q = p ou q = n) :

$$\Lambda = Diag\{\lambda_1, \dots, \lambda_q\}$$

$$V = \begin{bmatrix} v_1 & \cdots & v_q \end{bmatrix};$$

$$U = \begin{bmatrix} u_1 \\ \vdots \\ u_q \end{bmatrix};$$
Eq. 4-13

Si λ_i n'est pas réelle, il est admis qu'il existe un indice *i* pour lequel $\lambda_i = \overline{\lambda_i}$. Il vient donc dans les matrices V et W: $v_i = \overline{v_i}$, $w_i = \overline{w_i}$ et dans les matrices U et T: $u_i = \overline{u_i}$, $t_i = \overline{t_i}$. Les vecteurs u_i et v_i sont normalisés de telle sorte que :

$$UV = I$$
 et $UV = \Lambda$ Eq. 4-14

4.5.1.2 Définition du concept de mode

Outre la définition de la notion de mode, ce paragraphe a pour but d'étudier les différentes relations existant entre excitations – modes – et sorties, en terme de structure propre. Dans cette section, et ce à des fins de clarté, nous considérons un système ne possédant pas de transmission directe (D=0). Les différents vecteurs pris en considération sont :

- ✓ Le vecteur de perturbation *d*. Ces perturbations sont distribuées sur les états et les sorties du système respectivement par E' et F',
- ✓ Le vecteur des conditions initiales x_0 .

Définitions des modes :

Soit le changement de base d'état où U (à partir de (Eq. 4-14), $U=V^{-1}$) correspond à la matrice des *n* vecteurs propres à gauche en boucle fermée (*idem* (Eq. 4-13)).

$$\xi = Ux$$
 Eq. 4-15

où

$$\boldsymbol{\xi} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{\xi}_1 \\ \vdots \\ \boldsymbol{\xi}_n \end{bmatrix}$$

Les différentes composantes de ce vecteur seront appelées modes du système.

Une relation évidente entre modes, états et vecteurs propres à gauche du système apparaît ici. Dans la suite de cette section, les différentes relations existant entre excitations, modes et sorties du système seront détaillées.

Relations entre excitations et modes :

L'effet de la condition initiale est modélisé par une fonction de Dirac $x_0\delta$. D'où :

$$\dot{x} = Ax + Bu + E'd + x_0\delta$$

Soit :

$$\dot{x} = Ax + f$$

où *f* correspond à toutes les excitations agissant sur le système ($f = Bu + E'd + x_0\delta$). Après avoir appliqué le changement de base ($\xi = Ux$)

$$\dot{\xi} = \Lambda \xi + Uf$$

Il vient

 $\xi(t) = e^{\Lambda t} * U f(t)$

où « * » est le produit de convolution et $e^{\Lambda t}$ la matrice diagonale

$$e^{\Lambda t} = Diag\left\{e^{\lambda_1 t}, \dots, e^{\lambda_n t}\right\}$$

De plus

$$\xi_i(t) = e^{\lambda_i t} * u_i f(t) = \int_0^t e^{\lambda_i (t-\tau)} u_i f(\tau) d\tau \qquad \text{Eq. 4-16}$$

Relations entre modes et états :

En revenant à la base originelle, on obtient :

$$x = V\xi = \sum_{i=1}^{n} v_i \xi_i$$
 Eq. 4-17

Cette relation montre que les vecteurs propres à droite du système dirigent les modes sur les états.

Relation entre entrées et sorties :

Ici f = Bu. Au lieu de considérer le vecteur d'état comme ci-dessus, nous considérerons la sortie y = Cx. Le terme Cx peut s'écrire $CV\xi$. La transmission des modes devient :

$$\xi_i(t) = e^{\lambda_i t} * u_i B u \quad \text{et} \quad y = \sum_{i=1}^n C V_i \xi_i$$

Les transferts entre u et ξ et entre les modes et y peuvent s'écrire :



La relation en boucle ouverte entre entrées et sorties est donnée par :

$$y(t) = \sum_{k=1}^{n} C v_k \int_0^t e^{\lambda_k (t-\tau)} u_k B u(t) d\tau \qquad \text{Eq. 4-18}$$

Récapitulatif :

L'analyse du comportement d'un système commandé a été effectuée dans la base modale. Chaque mode est associé à une valeur propre λ du système sous la forme $e^{\lambda t}$. Nous avons montré que :

- les excitations agissent sur les modes par l'intermédiaire des vecteurs propres à gauche U
- les modes sont distribuée sur les sorties régulées par l'intermédiaire des vecteurs propres à droite V et des directions d'entrée W:



4.5.2 CONCEPT DE LA SIMULATION MODALE

Il s'agit ici d'analyser le *comportement modal* d'un système. Ce type de technique est utilisé lorsque l'on désire analyser les couplages entre les entrées, les modes, les sorties, ...etc. Elles permettent d'évaluer la contribution de chaque mode sur une sortie donnée.

Considérons un signal décomposé selon l'équation Eq. 4-18 :

$$y_k(t) = C_k v_1 \int_0^t e^{\lambda_1 \left(t-\tau\right)} u_1 B u(\tau) d\tau + \dots + C_k v_n \int_0^t e^{\lambda_n \left(t-\tau\right)} u_n H u(\tau) d\tau \qquad \text{Eq. 4-19}$$

où y_k correspond à la $k^{\text{èmes}}$ entrée de y.

La simulation modale consiste à simuler chaque composante

$$C_k v_i \int_0^t e^{\lambda_i (t-\tau)} u_i B u(\tau) d\tau$$
 Eq. 4-20

du signale $y_k(t)$ séparément. Cette évaluation donne une information sur la contribution des modes λ_i aux sorties. Elle permet aussi d'évaluer la nature, oscillatoire ou amortie de cette contribution.





Figure 4-12 : Exemple de simulation modale. A gauche sont représentées les contributions de chaque mode, à droite la contribution globale

Cet exemple de simulation modale est extrait de la *Modal Control Toolbox* (Magni, 1997). Il correspond au système (a, b, c, d) décrit par :

$$a = \begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -0.1 & -1 & 0 \\ 0 & 1 & -0.1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -2 \end{bmatrix} \qquad b = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 1 & 1 \\ 0 & 1 \\ 1 & 1 \end{bmatrix}$$
$$c = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 1 \end{bmatrix} \qquad d = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}$$

La simulation est destinée à illustrer la participation modale des modes du système à la troisième sortie. Une excitation de type échelon est appliquée en entrée. A gauche de la Figure 4-12 sont tracées les différentes composantes de la forme Eq. 4-20 et à droite est tracée la somme des différentes composantes. Sur cette figure, on peut observer que le mode –1 n'a

aucune influence sur la sortie considérée. Il ne sera donc pas nécessaire d'agir sur ce mode pour modifier le comportement de la troisième sortie. Par contre, les modes en -0.1+i et en -2 contribuent fortement à cette sortie et devront être pris en considération lors de la synthèse. De plus, la simulation modale donne une information sur la nature de la contribution de ces deux modes (régime transitoire et permanent). Par exemple, la première est fortement oscillatoire alors que la seconde est amortie. Cette information illustre de manière visuelle le fait que les modes sont associés à des valeurs propres de natures très différentes. A partir de cette analyse, le concepteur à une idée précise de la décomposition modale du système. Il peut alors décider sur quels modes agir pour influencer les sorties à réguler.

Définition 4-5 : (Structure propre dominante).

On définit par structure propre dominante l'ensemble des couples de valeurs propres et vecteurs propres ayant une influence prépondérante en termes de transfert entrée/sortie. La simulation modale permet de déterminer l'influence de chaque mode sur les sorties du système et donc d'isoler les couples de valeurs propres et de vecteurs propres ayant une influence prépondérante. La contribution de chaque mode est évaluée au sens d'une norme H_2 .

4.5.3 <u>Simulation modale du modele linearise</u>

Nous allons dans cette section étudier par le biais de la simulation modale l'influence des différents modes sur le comportement entrées-sorties du système. Le fait d'évaluer la contribution de chaque mode sur les variables de sorties permettra de déterminer et d'isoler les modes les moins influents sur les sorties du système. La détermination de la structure propre dominante va nous permettre de faire une réduction de modèle en gardant les modes ayant une influence prépondérante sur le comportement entrées-sorties du système.

Les différentes simulations modales ont été réalisées en utilisant la fonction « *lsim_mod* » de la « *Modal Control Toolbox* » (Magni, 1997). Cette fonction permet de réaliser des simulations modales en illustrant la participation modale des modes du système sur chaque variable de sortie. Afin de limiter le nombre de figures, nous présenterons uniquement les figures relatives à la viscosité et à la température matière au niveau de la vis inverse.

Une excitation de type échelon est appliquée aux différentes variables d'entrée du système. Les échelons ont été appliqués à différents instants :

- ✓ t = 0 seconde → échelon sur la vitesse des vis (10 % de la valeur d'équilibre);
- ✓ t = 1000 secondes → échelon sur le débit (10 % de la valeur d'équilibre) ;
- ✓ t = 2000 secondes → échelon sur le rapport $[M_0]/[I_0]$ (10 % de la valeur d'équilibre) ;
- ✓ t = 3500 secondes → échelon sur les puissances de chauffe des fourreaux (10 % de la valeur d'équilibre);

Sur la Figure 4-13 (a) et (b) sont tracées respectivement les contributions de chaque mode et la somme des différentes contributions pour la première variable de sortie du modèle linéaire (la viscosité en filière). Le nombre important de pôles ne permet pas de voir d'une manière claire la contribution de chaque mode sur la sortie notamment lors de l'application de l'échelon en vitesse et en débit d'alimentation (pour *t* variant entre 0 et 2000 secondes). Cependant, un zoom sur cet intervalle Figure 4-14 montre que les modes -0.40216, -0.28758, -0.00322 et 0.010828 se distinguent des autres modes en apportant plus d'influence sur la sortie.

Par ailleurs, à partir de l'instant où en applique l'échelon sur le rapport $[M_0]/[I_0]$ et sur les puissances de chauffe (pour *t* variant entre 3000 et 6000 secondes) (Figure 4-13), on voit apparaître d'autres modes influents -0.026604, -0.055277 et -0.0023588. Leur contribution semble gouverner le comportement de la sortie. Ainsi, on peut constater que les modes dominants peuvent varier selon l'entrée excitée. Toutefois, il est nécessaire de regarder la contribution de chaque mode sur l'ensemble des excitations appliquées en entrée. Par exemple on peut voir sur la Figure 4-14 que le mode -0.026604 n'a aucune influence sur la sortie pour les échelons de vitesse et de débit d'alimentation. Par ailleurs, lors de l'application d'un échelon sur le rapport $[M_0]/[I_0]$ ou sur les puissances de chauffe (Figure 4-13), on constate que ce mode contribue fortement à cette sortie et il devra être pris en considération lors de la réduction de modèle.



Figure 4-13 : Simulation modale de la viscosité en filière : en haut sont représentées les contributions de chaque mode (a), en bas la contribution globale (b)



Figure 4-14 : Zoom sur les contributions des modes sur la sortie viscosité (échelon vitesse et débit)

La Figure 4-15 représente la simulation modale de la température matière en vis inverse. La même démarche d'analyse, que celle menée pour la viscosité, peut être appliquée sur cette sortie pour déterminer les modes influents.



Figure 4-15 : Simulation modale de température matière en vis inverse : en haut sont représentées les contributions de chaque mode, en bas la contribution globale

Si on compare les deux figures 4-13 et 4-15, on constate que les modes dominant vont varier selon la sortie prise en compte. Ceci vient du fait que l'évolution temporelle des différentes variables n'est pas la même. Ainsi, on peut se retrouver face à un cas où un mode n'est pas très influent par rapport à une variable donnée alors que sa contribution peut être significative pour une autre d'entrée. De ce fait, il est nécessaire, lors de la réduction du modèle, de vérifier que les modes supprimer n'affecte aucune des variables de sortie considérées.

Remarque : Dans notre étude, nous avons choisi la viscosité comme variable à commander afin de contrôler la qualité du polymère en sortie de filière (ce point sera développe dans le

chapitre 5 lors de l'élaboration de la loi de commande). Par conséquent, nous avons effectué cette étude par rapport à la viscosité en vérifiant à chaque étape de réduction que le mode négligé n'affecte pas les autres variables de sortie.

4.5.4 <u>REDUCTION DE MODELE PAR SIMULATION MODALE</u>

Le but de cette étude est donc de réduire la taille du modèle linéaire en se basant sur la simulation modale dont le principe a été présenté dans la section 4.5.2.

Les différentes simulations présentées dans la section précédente (Figure 4-13 et Figure 4-15) ont été réalisées en prenant en compte la contribution de tous les modes du système. En effet, la fonction « *lsim_mod* » permet de réaliser des simulations modales en donnant le choix à l'utilisateur de fixer le nombre de modes qu'il veut visualiser. Si ce nombre est inférieur au nombre total des modes du système, la fonction « *lsim_mod* » supprime automatiquement les modes les moins influents par rapport à la variable de sortie étudiée. En même temps, elle réalise une simulation en faisant une comparaison entre la sortie avec et sans les modes supprimés.

Le Tableau 4-13 représente l'erreur relative moyenne entre le modèle linéaire complet et réduit (avec *n* qui caractérise le nombre de modes pris en compte). On constate alors qu'à partir d'un nombre de modes égal à 17, l'erreur entre les deux modèles augmente. Comme le montre le Tableau 4-13, la température matière au niveau de la vis inverse et la viscosité sont les variables de sorties les plus sensibles sur l'ensemble des simulations réalisées.

Sortie	Erreur relative moyenne				
	n=19	n=17	n=16	n=14	n=10
T^m_{ivv}	5.43E-04	8.21E-03	3.26E-01	3.57E-01	3.54E-01
T^m_{fil}	7.08E-05	1.82E-04	1.94E-01	2.28E-01	2.23E-01
T_{inv}^{f}	1.26E-02	1.25E-02	2.19E-01	2.17E-01	1.96E-01
T_4^f	1.46E-03	1.46E-03	4.25E-02	4.28E-02	4.34E-02
T_{fil}^{f}	3.57E-04	3.57E-04	8.52E-02	6.89E-02	7.12E-02
$\eta_{_{fil}}$	3.59E-05	6.63E-04	2.20E-01	2.12E-01	2.88E-01

Tableau 4-13 : Erreur quadratique moyenne pour les différents modèles réduits

La simulation modale sur la viscosité est représentée sur la Figure 4-16 avec une représentation de la contribution des 16 modes les plus influents.



Figure 4-16 : Simulation modale sur la viscosité pour un nombre de modes égal à 16

D'autre part, la Figure 4-17 illustre une comparaison entre le modèle linéaire complet et le modèle linéaire réduit sur l'ensemble des variables de sortie et pour un nombre de modes égal à 16. Cette figure corrobore les résultats présentés dans le Tableau 4-13 à savoir l'influence de la réduction sur la température matière en vis inverse ou sur la viscosité, ... etc.



Figure 4-17: Comparaison des variables de sortie du modèle linéaire complet et du modèle linéaire réduit pour un nombre de modes pris en compte égal à 16

Enfin, pour clore l'étude sur la réduction de modèle par simulation modale, nous avons effectué plusieurs simulations modales en prenant en compte 19, 16 et 13 modes

(Figure 4-18 et Figure 4-19). Ceci permet de voir l'influence que peut avoir cette réduction sur le comportement statique et dynamique du modèle réduit. Nous avons limité la représentation des effets de la réduction sur les deux variables de sorties les plus sensibles que sont la viscosité et la température matière en filière.

A travers les différents résultats obtenus, nous estimons que le modèle réduit obtenu avec 17 modes semble assurer un bon compromis concernant les performances du modèle réduit en régime statique et dynamique. Ce dernier sera par la suite utilisé pour l'élaboration de la loi de commande. En effet, à partir d'un nombre de mode égal à 17, on observe l'apparition d'une erreur statique entre le modèle linéaire réduit et le modèle linéaire complet. Cette erreur est d'autant plus importante au niveau de la vis inverse (température matière et fourreau).









e) 13 modes

Figure 4-19 : comparaison de la température matière en vis inverse entre le modèle linéaire complet et réduit pour plusieurs modes

4.6. <u>CONCLUSION</u>

Ce chapitre a été entièrement consacré à l'analyse et à l'élaboration d'un modèle de commande à partir du modèle de simulation global. Dans la première partie, nous avons mené une étude sur le modèle non linéaire afin de déterminer les paramètres les moins influents sur le comportement dynamique et statique du modèle. Il ressort de cette analyse que la contribution de la température des vis sur le comportement du modèle est très restreinte. Nous avons aussi constaté que le fait de regrouper les zones partiellement remplies permet de réduire la taille du modèle sans altérer d'une manière significative sa conduite. Le regroupement se fait en calculant un pas et une longueur de vis équivalente à l'ensemble des

zones regroupées. Cette première partie d'étude, nous a permis de déduire un modèle non linéaire réduit en éliminant la contribution des vis au niveau du comportement thermique et en regroupant certaines zones partiellement remplies.

La deuxième partie de ce chapitre a été consacrée à l'élaboration et la validation du modèle linéarisé tangent à partir du modèle non linéaire réduit. Le modèle linéaire obtenu comporte :

- ✓ 8 variables d'entrée (vitesse des vis, débit d'alimentation, rapport $[M_0]/[I_0]$ et les puissances de chauffe) ;
- ✓ 8 variables de sortie (viscosité, température matière au niveau de la vis inverse et de la filière et enfin 5 températures fourreaux)

22 états.

Le modèle linéaire obtenu a été validé autour d'un point de fonctionnement en comparant son évolution dynamique et statique à celle du modèle non linéaire. Cette comparaison a été effectuée en excitant par des échelons les différentes variables d'entrée des deux modèles. D'une manière générale, le modèle linéaire suit correctement la conduite du modèle non linéaire sur l'ensemble des excitations appliquées en entrée. Toutefois, dans l'ensemble l'analyse menée sur le modèle linéaire permet de valider son comportement autour du point de fonctionnement.

Enfin, dans la dernière partie, nous avons introduit un ensemble de concepts liés à l'analyse modale. Nous avons alors exploité cette technique d'analyse afin de faire une réduction de modèle par simulation modale. Ainsi, à partir de la simulation modale, nous avons pu déterminer l'influence de chaque mode sur le comportement entrées-sorties du système. L'ensemble de l'analyse modale a été effectué sur la variable de sortie caractérisant la viscosité. Plusieurs simulations modales ont été effectuées afin de repérer les modes ayant une influence prépondérante sur le comportement de l'ensemble des sorties. Le modèle obtenu avec 13 modes influents a été retenu pour l'élaboration de la loi de commande.

CHAPITRE 5 : COMMANDE DU PROCEDE D'EXTRUSION REACTIVE

5.1. INTRODUCTION

Les procédés d'extrusion sont essentiellement des systèmes multi-entrées, multisorties (système *MIMO* : Multiple-Input, Multiple-Output). L'influence des perturbations et des variables d'entrées sur les variables de sorties est fortement non-linéaire et implique de fortes interactions et des temps de retard. Ces caractéristiques rendent le développement et l'implémentation de lois de commande relativement complexes. L'utilisation de lois de commandes élaborées (commande adaptative, prédictive, robuste,...) est alors nécessaire pour assurer un contrôle efficace du procédé. De plus, la structure du procédé d'extrusion (système *MIMO*) et sa complexité (procédé fortement non-linéaire à paramètres répartis) rendent l'emploi des techniques de commande de type *SISO* (Single-Input, Single-Output) inadéquat pour le contrôle (Kulshreshtha et al., 1995).

Dans le chapitre 4, nous avons présenté les différentes étapes d'analyse pour synthétiser un modèle dit de commande, c'est-à-dire utilisable pour la synthèse pratique de lois de commande. C'est ce modèle qui servira pour la synthèse de la loi de commande.

Après une présentation des différents travaux menés sur la commande des procédés d'extrusion, nous allons présenter dans ce chapitre la technique de synthèse H_{∞} standard et ses deux méthodes de résolution par équation de Riccati et par inégalités matricielles affines. La synthèse H_{∞} a été réalisée avec modèle de référence sur la trajectoire en viscosité et rejection de perturbation.

La loi de commande élaborée a été appliquée à la fois sur le modèle linéarisé et aussi sur le modèle complet non linéaire au voisinage d'un point de fonctionnement. Différentes simulations ont été réalisées et commentées en fin de ce chapitre.

5.2. <u>ETUDE BIBLIOGRAPHIQUE</u>

Au terme de la recherche bibliographique menée, nous avons constaté que la majorité des travaux réalisés sur la commande des procédés d'extrusion concerne le domaine agroalimentaire. En effet, l'utilisation de l'extrusion en agroalimentaire attire de plus en plus d'industriels du fait de la variété des produits qu'elle fournit (pain plat, pâtes, céréales pour

petit déjeuner, snacks,...) et de l'apport économique important qu'elle assure. La qualité du produit final en sortie de filière est alors un enjeu très important et la concurrence entre les différentes compagnies industrielles ont motivé les recherches scientifiques notamment dans les procédés de cuisson-extrusion. Le but de ces recherches est :

- ⇒ De développer de nouveaux produits alimentaires,
- ⇒ D'améliorer la qualité du produit,
- ⇒ De réduire les déchets donc d'améliorer l'efficacité du procédé.

Parmi les études réalisées dans le domaine du contrôle, on note celle de Kulshreshtha et al. (1995) effectuée sur le contrôle de la qualité d'un produit alimentaire. Les auteurs ont proposé une approche de commande simple basée sur l'ajout d'un modèle permettant d'ajuster le point d'équilibre afin de compenser l'effet des variations des variables non-régulées sur le comportement du procédé. Le but de cette approche est d'améliorer les performances d'un contrôleur PI mono-entrée, mono-sortie « débit d'alimentation – pression en filière » (système *SISO*) et en même temps d'éviter l'utilisation d'une technique de contrôle de type *MIMO* beaucoup plus complexe à mettre en oeuvre.

Dans le cadre des procédés d'extrusion alimentaire, les auteurs signalent que d'une manière générale les principaux paramètres pouvant être corrélées à la qualité du produit sont : la température de la filière T_{fil} , la pression en filière P_{fil} et l'énergie mécanique fournie E(shaft power). Ces paramètres caractérisent les variables de sortie du procédé. D'un autre côté, le débit d'alimentation en matière sèche F_d , le débit d'alimentation en eau F_w , la vitesse des vis N et la température fourreau T_f peuvent être considérés comme étant les variables d'entrée du procédé.

Ainsi, en se basant sur les modèles dynamique et statique développés respectivement par Kulshreshtha et Zaror (1992) et par Kulshreshtha et al. (1991), les auteurs ont analysé le comportement statique et dynamique de chaque variable de sortie (P_{fil} , T_{fil} et E) vis-à-vis des variations opérées sur les paramètres d'entrée (débit d'alimentation F (F_d+F_w), teneur en eau M (déterminée à partir de F_d et F_w) et la vitesse de rotation des vis N). Cette analyse a été menée par les auteurs afin de déterminer la paire « variable d'entrée - variable de sortie » la mieux adaptée pour l'élaboration de la loi de commande. Concernant la température fourreau T_{f} , celle-ci n'a pas été prise en compte car, d'après les auteurs, elle présente une réponse lente du fait de la forte inertie thermique du fourreau. D'autre part, la température filière T_{fil} n'a pas été utilisée comme variable de sortie du fait qu'elle n'est pas représentative de la température réelle de la matière. De plus, elle présente une réponse dynamique relativement lente du fait de l'inertie thermique de la filière. Toutefois, les auteurs signalent qu'elle est un indicateur important de l'état du procédé. Elle peut être utilisée comme variable secondaire dans une seconde boucle de contrôle afin de compenser les dérives du procédé.

Une analyse a été menée par les auteurs pour choisir la variable d'entrée et de sortie adéquate pour la synthèse de la loi de commande. Les résultats de cette analyse montrent que la paire « débit d'alimentation – pression en filière » est la mieux adaptée pour le contrôle de la qualité du produit. Les auteurs notent que la vitesse des vis est impropre pour être utilisée comme variable de commande. Ceci est dû aux non-linéarités et à la réponse inverse de la pression en filière qui apparaissent lors de l'application d'un échelon de vitesse.

Au final les auteurs ont donc choisi de réguler la pression en filière par le biais du débit d'alimentation dans le but de contrôler la qualité du produit. Ceci représente un contrôle indirect du fait de l'absence d'un capteur qui mesure directement la qualité du produit. Néanmoins, les auteurs utilisent le volume spécifique de l'extruda *SV*, qui caractérise la dilatation volumique en filière, comme paramètre clé de la qualité du produit. Les auteurs donne une corrélation reliant *SV* à la pression P_{fil} (Mpa), la température T_{fil} (C°) et l'énergie mécanique spécifique SE (Kw/h) (Eq. 5-1)

$$SV = 66.245 + 1.54 \cdot P_{el} - 0.894 \cdot T_{el} - 1.65 \cdot SE + 3.23e - 3 \cdot T_{el}^{2} + 7.1e - 2 \cdot SE^{2}$$
 Eq. 5-1

Kulshreshtha et al. (1995) ont par la suite proposé un correcteur PI simple (Figure 5-1) dont les performances ne sont pas satisfaisantes. Ceci est lié aux non linéarités et aux interactions du modèle. Ce problème illustre l'inefficacité des techniques de contrôle de type *SISO* pour commander les procédés d'extrusion.



Figure 5-1 : Boucle de contrôle avec un PI simple (Kulshreshtha et al., 1995)

Pour remédier à ce problème et en même temps pour éviter l'utilisation d'une technique de commande de type *MIMO*, plus complexe à mettre en œuvre, les auteurs proposent une approche qui consiste à ajouter un modèle permettant d'ajuster de manière continue le point d'équilibre en prenant en compte la variation des variables non-régulées (T_{fil} et *SE*) (Figure 5-2). Ce modèle est basé sur le modèle de qualité (Eq. 5-1). Il est donné par :

$$P_{fil}^{*} = \left(SV - 66.245 + 0.894 \cdot T_{fil} + 1.65 \cdot SE - 3.23e - 3 \cdot T_{fil}^{2} - 7.1e - 2 \cdot SE^{2}\right) / 1.54$$
 Eq. 5-2



Figure 5-2 : Boucle de contrôle avec ajustement du point d'équilibre (Kulshreshtha et al., 1995)

Le correcteur ainsi conçu présente de bons résultats à savoir une bonne régulation de la qualité du produit lors de l'application d'une perturbation au niveau du procédé (échelon de 10% en teneur en eau). Toutefois, malgré les avantages que présente cette approche, les

auteurs signalent la nécessité d'avoir un modèle fiable qui permet de relier les variables mesurables du procédé à la qualité du produit.

Singh et Mulvaney (1994) proposent un schéma de régulation par PID d'une extrudeuse bivis en se basant sur un système « multi-entrées, multi-sorties ». Les entrées sont la vitesse de rotation des vis, la teneur en eau, le profil thermique des fourreaux et le débit d'alimentation. Les sorties sont la pression en filière, la température du produit en sortie de l'extrudeuse et le couple moteur. Le comportement de l'extrudeuse est modélisé par plusieurs fonctions de transferts afin de prendre en compte le couplage entre chaque entrée sur chaque sortie. Ces fonctions de transferts sont de plusieurs types : du premier et second ordre avec et sans retard. Elles ont été déterminées par Lu et al. (1992) lors de son étude sur le comportement dynamique d'un procédé d'extrusion de farine de maïs.

Après une analyse menée sur le choix des variables d'entrée et de sortie, les auteurs déterminent que les paires « vitesse de vis – couple moteur » et « température fourreau – température matière » sont les mieux adaptées pour l'élaboration de la loi de commande. Le débit d'alimentation et la teneur en eau peuvent être utilisés comme des perturbations pour le système.

La stratégie de commande élaborée pour ce système consiste en deux boucles de régulation par PID non-découplés. Les simulations montrent une bonne régulation des deux boucles sans apparition d'instabilité. Ceci est lié à l'important écart existant entre le temps de réponse de chaque boucle et au faible effet d'une boucle sur l'autre. Ces caractéristiques rendent alors le système naturellement découplé.

Il faut noter que le choix des variables d'entrée et de sortie a largement contribué au bon fonctionnement de la régulation. Or, comme le signalent les auteurs, le simple fait d'ajouter la pression comme variable de sortie aurait compliqué les choses en créant des disfonctionnement de la régulation. Ceci montre les limites des stratégies de commandes classiques (PID, PI, ...) face à des procédés complexes et multivariables tels que les procédés d'extrusion.

Toujours dans le domaine agroalimentaire, Moreira et al. (1990) ont développé un modèle traduisant le comportement transitoire d'un procédé d'extrusion de farine de maïs en utilisant des fonctions de transfert (premier ordre, second ordre avec retard, ...). Les

différentes fonctions de transferts ont été développées en observant la réponse des variables de sorties (pression et température matière) à des échelons appliqués en entrées (vitesse de vis, débit d'alimentation et teneur en eau). Les différentes expériences ont été réalisées en extrudeuse bivis corotative Baker-Perkins (50 mm). Celle-ci est équipée de 9 régulateurs PID, huit sont utilisés pour réguler la température des fourreaux et le dernier pour réguler la température des parois de la filière. Un thermocouple et un capteur de pression sont positionné en filière pour mesurer la température matière et la pression.

Le but de cette étude est d'analyser le comportement du procédé afin de proposer une stratégie de commande adéquate pour réduire les effets de la teneur en eau et du débit d'alimentation (perturbations) sur la pression en filière. La température matière en filière n'a pas été choisie lors de l'élaboration de la stratégie de commande car sa réponse est lente et peu significative vis-à-vis des variations exercées en entrée du procédé.

La vitesse de rotation des vis a été choisie par les auteurs pour réguler la pression en filière. Ce choix est justifié par le fait que la vitesse des vis a un effet immédiat et signifiant sur la pression en filière. D'un autre côté, la réponse de la pression aux variations de débit d'alimentation ou de la teneur en eau présente un important temps de retard. Pour cette raison, les auteurs ont préféré ne pas les utiliser comme variables pour la commande mais plutôt comme des perturbations affectant le système.

La stratégie de commande utilisée par les auteurs consiste en une combinaison d'un contrôle feedback et feedforward. Le contrôle feedforward minimise l'erreur due aux perturbations (débit d'alimentation et la teneur en eau) alors que le feedback compense les imperfections du fonctionnement du feedforward control et corrige les perturbations non mesurables telles que l'usure de la machine. Le résultat de la simulation montre que la stratégie de commande développée permet de réduire les effets des perturbations sur la pression en sortie de filière. Toutefois, il est clair que la pression en filière est corrélée à plusieurs paramètres du procédé et qu'une simple stratégie de contrôle de type *SISO* utilisant uniquement la vitesse des vis pour la régulation n'est pas suffisante pour une large gamme de variation des conditions opératoires.

Wang et Tan (2000) proposent un algorithme de commande multi-variables basé sur la stratégie de commande prédictive. Ces derniers ont appliqué un algorithme de commande nommé « commande prédictive à double objectifs » (Dual-Target Predictive Control

« DTPC ») pour le contrôle d'un procédé d'extrusion alimentaire. La stratégie de commande développée permet à la fois de suivre les spécifications en terme de consigne au niveau des sorties et des entrées du système.

Dans le cas où les objectifs de consigne entre les entrées et les sorties ne seraient pas réalisables, l'algorithme minimise dans ce cas l'erreur totale puis répartit les erreurs entre les différentes variables selon les pondérations spécifiées par l'utilisateur. Le modèle utilisé dans cette étude a été développé par Chang et Tan (1993a, b) pour un procédé d'extrusion bivis alimentaire. Les variables d'entrées sont : la vitesse des vis, le débit d'alimentation et la teneur en eau et les variables de sorties sont la pression et la température en filière. Les deux cas ont été étudiés à savoir le cas où les objectifs de consigne entre les entrées et les sorties sont réalisables ou non.

La stratégie de commande élaborée a été par la suite implémentée et validée sur une extrudeuse bivis (APV Baker -50/25) en utilisant un algorithme d'estimation paramétrique pour l'identification en ligne des paramètres du modèle. Ce système d'identification permet au modèle de s'adapter en fonction des variations qui peuvent avoir lieu durant le procédé d'extrusion. Les résultats obtenus montrent l'efficacité de l'algorithme de contrôle à atteindre les différentes consignes appliquées en entrée et en sortie du procédé. Ce double objectif montre l'intérêt de l'utilisation de ce type de stratégie notamment dans le domaine agroalimentaire où la qualité du produit dépend à la fois des variables d'entrée (débit, teneur en eau,...) ainsi que des variables de sortie (pression, température matière, ...).

Concernant le contrôle de la température en extrudeuse bivis, Hofer et Tan (1993) ont développé et implémenté une stratégie de commande basée sur le « feedforward/feedback control » pour réguler la température matière sur une zone située en fin de l'extrudeuse. En effet, l'extrudeuse utilisée lors de cette étude a été divisée en neuf zones (Figure 5-3), les auteurs ont constaté que la plus forte augmentation de la température matière a lieu dans les trois dernières zones (zones 7, 8 et 9). Le modèle et la stratégie de commande ont été élaborés par rapport à la zone n° 8 en prenant comme entrée du système l'énergie de chauffe et l'effet de refroidissement des fourreaux et comme variables de sortie la température matière.



Figure 5-3 : Présentation de l'extrudeuse utilisée par Hofer et Tan (1993)

L'énergie mécanique spécifique (SME) a été considérée comme une perturbation affectant le système. Celle-ci dépend de la vitesse des vis, du débit d'alimentation et du couple moteur. D'autre part, pour un débit d'alimentation et une vitesse de vis donnés, le couple moteur donc SME dépend de la teneur en eau qui affecte directement la viscosité de la matière donc la température matière à travers les dissipations visqueuses. Ainsi, un modèle de type ARMAX (*auto-regressive moving-average model with auxiliary input*) a été utilisé pour prédire le comportement de la SME. Ce modèle est nécessaire pour le développement de la stratégie de commande car la SME influence considérablement le comportement thermique de la matière.

De la même manière, les auteurs ont développé un modèle ARX (*auto-regressive model with auxiliary input*) pour décrire l'évolution de la température matière qui dépend à la fois des effets de chauffe et de refroidissement des fourreaux et de l'énergie mécanique spécifique.

La stratégie de commande développée comporte quatre boucles de contrôle : la première boucle caractérise le feedforward contrôle. Elle a été établie pour annuler les effets de la SME sur la température matière en faisant varier l'énergie de chauffe et l'effet de refroidissement des fourreaux. Deux boucles de commande à modèle interne, utilisant deux prédicteurs de Smith, ont été rajoutées pour prédire le comportement de la température matière lors des variations des variables d'entrées et de la perturbation. Enfin, une dernière boucle caractérisant le feedback contrôle a été utilisée pour compenser les incertitudes de modélisation et l'usure du procédé.

Le régulateur développé a été implémenté sur une extrudeuse bivis alimentaire. Une nette amélioration de la stabilité de la température matière a été observée par rapport à

l'ancien système de régulation (tout-ou-rien). Toutefois, le domaine de validation du contrôleur est limité à un faible intervalle de variation des conditions opératoires. Les paramètres du modèle varient significativement d'une expérience à une autre même en fixant les conditions opératoires. La non-reproductibilité des expériences rend alors plus difficile la commande de ce procédé. Le régulateur montre une faible robustesse vis-à-vis des incertitudes de modélisation ce qui nécessite un réglage fréquent de ce dernier.

Dans une autre étude consacrée au contrôle de la température dans un procédé d'extrusion alimentaire utilisant la farine de maïs comme matière première, Tan et Hofer (1995) ont développé une stratégie de commande basée sur le formalisme de la commande à modèle interne prédictive et la commande par retour d'état (feedforwad) en se basant sur les résultats et les observations acquises dans leur étude précédente (Hofer et Tan, 1993). Le modèle et la stratégie de commande ont alors été élaborés au niveau de la zone n° 8 de l'extrudeuse (Figure 5-3) en gardant le débit d'alimentation et la chaleur net apportée au procédé constants dans les zones adjacentes.

Un modèle de type ARMAX a été utilisé pour modéliser la température matière dans la zone n° 8. Les auteurs ont gardé les mêmes variables d'entrées et de sorties que dans l'article cité précédemment (Hofer et Tan, 1993). La perturbation est représentée par le travail de l'arbre (W) qui caractérise l'énergie mécanique spécifique (SME). W a lui aussi été modélisé par un modèle de type ARMAX avec la teneur en eau (M) comme une entrée auxiliaire (Figure 5-4). Les autres perturbations non mesurables ont été approchées par un bruit blanc. D'un autre côté, les auteurs ont utilisé l'algorithme des moindres carrés normalisés (normalized least-mean-squares algorithm *NLMS*) pour une identification en ligne des paramètres des modèles de la température matière et de W. Des contraintes ont été imposées lors de l'identification paramétrique afin de prendre en compte les propriétés physiques de certains phénomènes tels que par exemple le fait que l'énergie de chauffe doit être toujours positif ou l'énergie de refroidissement qui doit être négatif De plus, une prédiction des variables de sorties sur une période dans le futur appelée « fenêtre de prédiction » a été utilisée dans l'identification et la stratégie de commande pour améliorer la robustesse vis-à-vis des incertitudes tel que le temps de retard.


Figure 5-4 : Diagramme bloc du contrôleur prédictif auto-réglable (Tan et Hofer, 1995)

Comme dans l'article précédent (Hofer et Tan, 1993), quatre boucles de commande ont été nécessaires pour le contrôle de la température matière : une boucle pour le feedforward contrôle, deux boucles pour la commande à modèle interne et une dernière boucle pour le feedback contrôle. Le concept de la commande prédictive a été employé lors de l'élaboration de la stratégie de commande. Cette approche a été utilisée pour le développement de la commande à modèle interne et le feedforward contrôle.

Toutefois, on peut reprocher aux auteurs le fait que leur stratégie de commande a été élaborée sur une seule zone de l'extrudeuse (zone n° 8) (Figure 5-3). Certes, dans le procédé d'extrusion que Tan et Hofer ont utilisé la température matière présente une variation significative qu'en fin de l'extrudeuse, cependant dans la majorité des cas, notamment dans le domaine des matériaux plastiques, la température matière évolue considérablement dés les premiers éléments du profil de vis. De plus, certains paramètres, tels que la vitesse des vis n'ont pas été pris en compte lors du développement de la stratégie de commande alors qu'elle affecte significativement le comportement thermique de la matière le long de l'extrudeuse par le biais des dissipations visqueuses.

Dans le but de commander la température des fourreaux d'un procédé d'extrusion de matières plastiques, Tsai et Lu (1998) ont proposé une stratégie de contrôle basée sur la

commande prédictive pour améliorer les performances de suivi de consigne, le rejet de perturbations et la robustesse de la commande vis-à-vis des incertitudes.

Le fourreau de l'extrudeuse est composé de quatre zones équipées d'un chauffage électrique individuel d'une capacité de 500 W pour la dernière zone (située près de la filière) et 1.5 kW pour les autres. Le modèle thermique des fourreaux a été développé en se basant sur le bilan d'énergie. Ce dernier comprend la conductivité thermique dans le métal et l'énergie de chauffe fournie aux fourreaux. Les échanges thermiques entre la matière et les fourreaux n'ont pas été pris en compte dans le bilan d'énergie. Les variables d'entrées du modèle sont les énergies de chauffe des fourreaux et les variables de sorties sont la température au niveau de chaque fourreau. Les perturbations caractérisant la circulation de l'air ambiant autour du fourreau et/ou les erreurs sur le signal de commande ont été modélisées par un bruit blanc gaussien. Le modèle élaboré a été discrétisé afin de pouvoir implémenter la stratégie de commande sur le procédé réel. Une identification était nécessaire pour estimer certains paramètres du modèle en utilisant la méthode des moindres carrés récursives. Le modèle mathématique multi-variables obtenu a par la suite été représenté sous la forme CARIMA (Controlled Auto-Regressive Integrated Moving Average).

Une stratégie de commande basée sur la combinaison de la commande prédictive généralisée (GPC : Generalized Predictive Control) et de la commande multi-variable autoréglable (STC : multivariable Self-Tuning Control) a été élaborée en minimisant une fonction coût. Après un réglage de la stratégie de commande en simulation, les auteurs ont mis en oeuvre le contrôleur élaboré sur le procédé réel en intégrant le système d'identification en ligne afin de rendre le contrôleur auto-reglable. Les conditions opératoires ont été choisies de telle sorte qu'on retrouve le cas spécial d'un contrôleur PI (horizon de contrôle unitaire et de consignes constantes). Différentes manipulations ont été réalisées pour valider la stratégie de commande développée en terme de suivie de consigne, de rejet de perturbations et de robustesse. Les résultats obtenus montrent que la stratégie de commande implémentée sur le procédé réel arrive à satisfaire ces différents critères. D'un autre part, il faut noter que la régulation thermique des fourreaux favorise la stabilité de la température matière mais cela ne signifie pas que celle-ci est bien régulée. La température matière en sortie de filière dépasse souvent la température de consigne des fourreaux à cause de l'apport de chaleur apportée par les dissipations visqueuses ou par le dégagement de la chaleur lors d'une réaction chimique dans le cas du domaine des matières plastiques.

L'étude menée par Haley et Mulvaney (2000a) a été consacrée à l'analyse et l'évaluation des méthodes d'estimation paramétriques avec l'objectif de trouver un algorithme d'estimation fonctionnant sous différentes conditions opératoires. Le but de cette étude est d'élaborer un système d'identification en ligne permettant le développer des stratégies de contrôle adaptatives et prédictives. L'étude a été menée sur un procédé d'extrusion bivis corotative alimentaire. Après l'analyse des différentes variables d'entrée et de sortie du procédé, Haley et Mulvaney estiment que la paire énergie mécanique spécifique (SME)/vitesse des vis (*N*) est la plus appropriée pour réguler de manière indirecte la densité de la matière. Différentes fonctions de transfert discrètes du premier, second et troisième ordre entre la charge du moteur (*ML*) qui caractérise l'énergie mécanique spécifique et la vitesse des vis ont été testés. L'analyse des résultats montre que la fonction de transfert discrète du premier ordre avec retard (lead-lag) est celle qui décrit le mieux la dynamique dominante du procédé dans tous les cas. La fonction de transfert qui représente la relation entre la charge du moteur et la vitesse des vis est donnée par :

$$ML(k) = G(z) \cdot N(k)$$
 avec $G(z) = \frac{b_0 - b_1 z^{-1}}{1 - a_1 z^{-1}}$ Eq. 5-3

 b_0 , b_1 et a_1 sont des paramètres à identifier.

Haley et Mulvaney (2000 b) ont ensuite élaboré une loi de commande pour réguler l'énergie mécanique spécifique en utilisant la vitesse des vis. Le but de cette étude est d'améliorer la qualité du produit en sortie de filière en minimisant la densité de la matière tout en gardant un débit d'alimentation élevé afin d'avoir une bonne productivité. Sachant que la densité de la matière n'est pas une variable facilement mesurable, il était nécessaire de développer un modèle inférentiel (inferential model) pour relier la densité de la matière aux variables mesurables du procédé. Les auteurs ont alors élaboré un modèle permettant de corréler l'énergie mécanique spécifique à la densité de la matière et à la teneur en eau.

La stratégie de commande développée par Haley et Mulvaney (2000 b) pour réguler la densité de la matière d'un procédé d'extrusion-cuisson représente une combinaison comprenant les éléments suivants :

 Une fonction de transfert linéaire décrivant la réponse de la charge du moteur à des variations de la vitesse des vis,

- 2. Un système d'identification en ligne pour l'estimation des paramètres de la fonction de transfert sous différentes conditions opératoires,
- Un modèle non-linéaire qui calcul l'énergie mécanique spécifique à partir de la charge du moteur,
- Un modèle inférentiel qui détermine la valeur de consigne appropriée de la SME à partir de la densité matière désirée.
- 5. Un contrôleur par retour d'état pour corriger les erreurs de modélisation et les perturbations,
- 6. Un filtre pour atténuer les bruits de mesures,
- 7. Un contrôleur pour réguler la teneur en eau.

La stratégie de commande élaborée donne des résultats de simulation satisfaisants. La loi de commande est robuste par rapport aux incertitudes de modélisation et aux perturbations.

En conclusion, ces études se basent sur une modélisation simpliste qui ne comporte pas tous les couplages existants entre les différents paramètres du procédé d'extrusion. Les modèles obtenus nécessitent une phase d'identification afin de déterminer certains paramètres nécessaires pour la représentation dynamique du procédé. Les lois de commande élaborées à partir de ces modèles présentent des limitations notamment lorsque le modèle utilisé est de type SISO.

Notre approche d'un point de vue modèle est beaucoup plus complète. L'analyse du modèle linéaire (de type MIMO) obtenu par linéarisation du modèle non linéaire montre qu'il est valable autour d'un point de fonctionnement. De plus, il présente l'avantage de prendre en compte les différentes interactions existantes au niveau du procédé d'extrusion réactive. Ce modèle est donc très approprié pour la synthèse d'une loi de commande.

5.3. <u>SYNTHESE DE LA LOI DE COMMANDE</u>

Dans ce qui va suivre, nous allons décrire la synthèse H_{∞} standard en présentant les outils nécessaire à cette approche (les valeurs singulières d'une matrice de transfert, la norme H_{∞} d'un système linéaire), la notion de problème standard et enfin nous présentons deux

méthodes de résolution : la résolution par équation de Riccati et la résolution par inégalités matricielles affines. Les différentes notions théoriques présentées sur la synthèse H_{∞} standard ont été rédigées en se basant sur les références suivantes (G. Scorletti et V. Fromion, 2001 ; Scorletti, 2004 ; G. Duc et S. Font, 1999 ; S. Font et al., 1997).

5.3.1 ANALYSE DES PRINCIPAUX TRANSFERTS D'UN ASSERVISSEMENT :

Considérons le schéma-bloc de la Figure 5-5, où G(s) est un modèle sous forme de fonction de transfert du système à asservir et K(s) le correcteur ; r et d sont respectivement la référence et une perturbation reçue en entrée du système ; u est la commande élaborée par le correcteur et y la sortie à asservir ; ε est l'erreur d'asservissement.



Figure 5-5 : Structure d'asservissement classique

On peut, à partir de ce schéma, exprimer la transformée de Laplace de l'erreur en fonction des transformées de Laplace des signaux appliqués :

$$\varepsilon(s) = r(s) - G(s)(K(s)\varepsilon(s) - d(s))$$

d'où :

$$\varepsilon(s) = \frac{1}{1 + G(s)K(s)} \cdot r(s) + \frac{G(s)}{1 + G(s)K(s)} \cdot d(s) = T_{\varepsilon r}(s)r(s) + T_{\varepsilon d}(s)d(s)$$
 Eq. 5-4

Pour la commande, on en déduit :

$$u(s) = \frac{K(s)}{1 + G(s)K(s)} r(s) + \frac{G(s)K(s)}{1 + G(s)K(s)} d(s) = T_{ur}(s)r(s) + T_{ud}(s)d(s)$$
Eq. 5-5

On met ainsi en évidence quatre transferts différents. L'étude de leur réponse fréquentielle renseigne sur les propriétés de l'asservissement : par exemple l'asservissement est sans erreur statique si les transferts $T_{af}(s)$ et $T_{af}(s)$ sont nuls en s=0.

Par ailleurs, on peut déduire très simplement l'allure de ces réponses fréquentielles (Figure 5-6), en faisant des hypothèses sur le gain en boule ouverte :

- > Dans les zones de grand gain, qui correspondent en général aux basses fréquences (bien en deçà de la bande passante de l'asservissement), $|G(j\omega)K(j\omega)|>>1$ et donc $1+G(j\omega)K(j\omega)\approx G(j\omega)K(j\omega)$. Les approximations reportées sur la Figure 5-6 montrent que le correcteur agit sur les transferts de *r* vers ε et de *d* vers ε , tandis qu'il est sans effet sur les transferts de *r* vers *u* et de *d* vers *u*.
- ➤ Dans les zones de faible gain, qui correspondent en général aux hautes fréquences (bien au-delà de la bande passante de l'asservissement), $|G(j\omega)K(j\omega)| << 1$ et donc $1+G(j\omega)K(j\omega)\approx 1$. Le correcteur agit sur les transferts de r vers u et de d vers u, tandis qu'il est sans effet sur les transferts de *r* vers ε et de *d* vers ε .



Figure 5-6 : Comportement asymptotique des transferts de la boucle fermée (S. Font et al., 1997)

5.3.2 NOTIONS ELEMENTAIRES DE ROBUSTESSE

La mise en équation d'un processus physique nécessite des approximations, d'où résultent par conséquent des incertitudes de modèle. De plus la synthèse du correcteur fait généralement appel à un modèle simplifié, dans lequel sont, par exemple négligées les dynamiques hautes fréquences du système, celles des capteurs ou actionneurs, d'éventuels retards purs...etc. Enfin, les paramètres du modèle ainsi obtenus sont toujours plus au moins entachés d'incertitudes.

On dit qu'une propriété du système asservi est *robuste* si cette propriété est garantie malgré la présence d'incertitudes. En particulier, on cherchera au moins à assurer au système asservi *la robustesse de la stabilité*. Une exigence plus importante consiste à garantir la robustesse d'une performance (telle que le taux de rejet d'une perturbation par exemple).

Ainsi, on ne peut parler de *robustesse* que par rapport à un *objectif* donné et aux types *d'incertitudes* considérées. Ces derniers peuvent se classer de la manière suivante :

- ✓ Les *incertitudes non-structurées* : Elles représentent les incertitudes influant sur le système mais pour lesquelles aucune information structurelle n'est disponible. Elles peuvent traduire par exemple des phénomènes hautes fréquences comme des dynamiques négligées dans un modèle (*incertitudes dynamiques*), des perturbations (*incertitudes fréquentielles*)...
- ✓ Les *incertitudes structurées* : Elles représentent des incertitudes dont on peut déterminer l'influence sur la structure du système étudié. Elles peuvent traduire des phénomènes basses fréquences comme des variations paramétriques dues à l'usure du système (*incertitudes paramétriques*)...

Les incertitudes de modélisation se traduisent par des dispersions sur la réponse fréquentielle du système à asservir (Figure 5-7). Dans ce qui va suivre, on examinera, suivant la gamme de fréquences, leurs conséquences et la façon dont on peut en tenir compte.



Figure 5-7 : Incidence des incertitudes de modélisation sur la réponse fréquentielle (S. Font et al., 1997)

5.3.2.1 Incertitudes sur la réponse fréquentielle en basse fréquence

D'après l'analyse de la section 5.3.1, le rôle du correcteur en basse fréquence est d'assurer des objectifs de *précision*, en agissant sur les transferts de *r* vers ε et de *d* vers ε . Ces objectifs peuvent être traduits explicitement par des conditions telles que :

$$\forall \omega: \left| T_{\varepsilon r}(j\omega) \right| = \left| \frac{1}{1 + G(j\omega)K(j\omega)} \right| \le \frac{1}{f_{\rm l}(\omega)}$$
 Eq. 5-6

$$\forall \, \omega \colon \left| T_{\varepsilon d}(j \, \omega) \right| = \left| \frac{G(j \, \omega)}{1 + G(j \, \omega) K(j \, \omega)} \right| \le \frac{1}{f_2(\omega)}$$
 Eq. 5-7

où $f_1(\omega)$ et $f_2(\omega)$ sont des fonctions de la fréquence, choisies pour assurer un gain suffisamment faible aux fonctions de transfert $T_{\varepsilon r}(s)$ et $T_{\varepsilon d}(s)$ (les relations Eq. 5-6 et Eq. 5-7 sont représentées symboliquement en gris sur la Figure 5-6).

Si on considère la première condition (Eq. 5-6) en supposant que $f_1(\omega)$ soit choisie de façon à représenter le module $|w_1(j\omega)|$ d'une fonction de transfert $w_1(s)$. La relation Eq. 5-6 peut alors s'écrire en utilisant la norme H_{∞} :

$$\forall \omega: |w_{l}(j\omega) \cdot T_{\varepsilon r}(j\omega)| \leq 1 \quad \Leftrightarrow \quad ||w_{l}(j\omega) \cdot T_{\varepsilon r}(j\omega)||_{\infty} \leq 1$$
 Eq. 5-8

Les incertitudes de modèle, dans cette zone de fréquence, sont peu gênantes : il suffit de choisir la fonction $f_1(\omega)$ (ou la fonction de transfert $w_1(s)$) pour que les objectifs d'atténuation soient remplis dans le cas le plus défavorable. En particulier si $f_1(0)$ est infini, le produit G(s)K(s) doit comporter un pôle en s=0, ce qui annule l'erreur statique quel que soit le gain statique du système.

5.3.2.2 Incertitudes sur la réponse fréquentielle en moyenne fréquence

Les incertitudes en moyenne fréquence (aux alentours de la bande passante de l'asservissement) sont par contre très préoccupantes, car elles peuvent remettre en cause la stabilité même de celui-ci : des modifications trop grandes du gain ou de la phase dans cette région peuvent en effet modifier le nombre d'encerclement du point (-1) dans le plan de Nyquist.



Figure 5-8 : Marge de module (ΔM), de gain (ΔG) et de phase ($\Delta \varphi$) (S. Font et al., 1997)

Or on peut exprimer la recherche de marges de stabilité par des contraintes sur la norme H_{∞} de la fonction de transfert $T_{\varepsilon r}(s)$. En effet, la marge de module ΔM (Figure 5-8), c'est-à-dire le minimum de la distance entre un point du lieu de Nyquist et le point (-1), s'écrit :

$$\Delta M = \min_{\omega} |G(j\omega)K(j\omega) - (-1)| = \frac{1}{\max_{\omega} \left| \frac{1}{1 + G(j\omega)K(j\omega)} \right|} \Rightarrow \Delta M = \frac{1}{\left\| T_{\varepsilon r}(s) \right\|_{\infty}}$$
Eq. 5-9

En définissant la fonction de sensibilité *S* comme étant égale à $\frac{1}{1+G(j\omega)K(j\omega)}$, la marge de module ΔM peut alors s'écrire :

$$\Delta M = \frac{1}{\left\| S(s) \right\|_{\infty}}$$
 Eq. 5-10

Remarquons que la marge de gain correspond à une incertitude sur le gain du système, indépendamment de la pulsation *ω*, donc à un type très spécifique d'incertitude.

5.3.2.3 Incertitudes sur la réponse fréquentielle en haute fréquence

Les incertitudes en hautes fréquences proviennent soit d'une méconnaissance de la réponse fréquentielle du processus lorsqu'on est au-delà de sa bande passante, soit de simplifications volontaires permettant de le modéliser plus facilement.

Pour étudier l'effet de ces incertitudes, on considère deux modèles : le premier $G_{mod}(p)$, appelé « modèle nominal », caractérise une représentation du système sans prise en compte des incertitudes, le second noté $G_{réel}(p)$ est un modèle qui décrit exactement le système c'està-dire en considérant les incertitudes. Une façon d'évaluer la différence entre le système réel et son modèle est d'introduire un transfert stable $\Delta(j\omega)$ tel que :

$$G_{r\acute{e}el}(j\omega) = G_{mod}(j\omega) + \Delta(j\omega)$$
 Eq. 5-11

La quantité d'incertitude peut alors être évaluée par un paramètre réel $\beta > 0$ tel que pour toute pulsation ω , $|\Delta(j\omega)| \le \beta$. Cette dernière condition peut se réécrire $||\Delta(j\omega)||_{\infty} \le \beta$. Ce type d'incertitude est appelé *incertitude additive* (Figure 5-9).



Figure 5-9 : Incertitude additive

Pour garantir que le système réel en boucle fermé soit stable, il faut démontrer que pour tout transfert stable $\Delta(j\omega)$ dont la norme H_{∞} est inférieure à β , on a le système bouclé représenté sur la Figure 5-5 avec $G(s) = G_{réel}(j\omega) = G_{mod}(j\omega) + \Delta(j\omega)$ qui est stable. Pour évaluer la stabilité de cet ensemble de systèmes en boucle fermée, il faut appliquer le critère de Nyquist pour toutes les fonctions de transfert en boucle ouverte $(G_{mod}(j\omega) + \Delta(j\omega))K(j\omega)$ obtenues par toutes les fonctions de transfert stables $\Delta(j\omega)$ telle que $|\Delta(j\omega)| \leq \beta$.

Une condition nécessaire est que pour $\Delta(j\omega)=0$, la condition du critère de Nyquist soit vérifiée. Pour assurer que, pour toutes les fonctions de transfert $\Delta(j\omega)$, le système bouclé reste stable, il suffit de vérifier que pour toutes les pulsations ω , les points $(G_{mod}(j\omega)+\Delta(j\omega))K(j\omega)$ ne recouvrent pas le point (-1, 0).

Pour une pulsation ω donnée, l'ensemble des points $(G_{mod}(j\omega) + \Delta(j\omega))K(j\omega)$ correspond à un disque de centre $G_{mod}(j\omega)K(j\omega)$ et de rayon $\beta |K(j\omega)|$ (Figure 5-10), quand $\Delta(j\omega)$ décrit l'ensemble des fonctions de transfert stables dont la norme H_{∞} est inférieure à β .



Figure 5-10 : Diagramme de Nyquist de G(jw)K(jw) (G. Scorletti et V. Formion, 2001)

Il faut donc que le disque ne recouvre pas le point (-1, 0). Pour cela, il suffit d'assurer que la distance entre le point (-1, 0) et le point $G_{mod}(j\omega)K(j\omega)$ est supérieure au rayon du disque, à savoir $\beta |K(j\omega)|$, soit :

$$\forall \omega, |1+G_{mod}(j\omega)K(j\omega)| > \beta |K(j\omega)| \iff$$

$$\forall \omega, \left| \frac{K(j\omega)}{1+G_{mod}(j\omega)K(j\omega)} \right| < \frac{1}{\beta} \iff ||KS||_{\infty} < \frac{1}{\beta} \qquad \text{Eq. 5-12}$$

où S est la fonction de sensibilité.



Figure 5-11 : Connexion de KS avec Δ

Le système bouclé peut se réécrire comme la connexion de la fonction de transfert *KS* avec le transfert Δ (Figure 5-11). Ce système est stable pour toute fonction de transfert stable Δ telle que $\|\Delta(j\omega)\|_{\infty} \leq \beta$ si et seulement si $\|KS\|_{\infty} < \frac{1}{\beta}$. Ceci est un cas particulier du théorème du petit gain qui sera introduit ci-après.

Stabilité interne :

Le système bouclé représenté dans la Figure 5-12a) est appelé système (M, Δ) . Ce système bouclé est dit *stable de façon interne* si la matrice de fonctions de transfert définie par :

$$\begin{bmatrix} q(s) \\ p(s) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} (I - M(s)\Delta(s))^{-1} & (I - M(s)\Delta(s))^{-1}M(s) \\ (I - \Delta(s)M(s))^{-1}\Delta(s) & (I - \Delta(s)M(s))^{-1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \varpi_1 \\ \varpi_2 \end{bmatrix}$$
Eq. 5-13

est stable (Figure 5-12b). De plus, on dit qu'une famille de systèmes est stable si chacun de ses membres est stable.



Figure 5-12 : Connexion de M avec Δ (G. Scorletti et V. Fromion, 2001)

Théorème 5-1 (Théorème du petit gain) : La famille de systèmes (M, Δ) représentés (Figure 5-12a) est stable pour toutes les (matrices) fonctions de transfert stables Δ telles que $\|\Delta(j\omega)\|_{\infty} \leq \beta$ (respectivement $\|\Delta(j\omega)\|_{\infty} <\beta$) si et seulement si $\|M\|_{\infty} <\beta$ (respectivement $\|M\|_{\infty} \leq \beta$).

En utilisant le Théorème 5-1, il est possible d'interpréter la marge de module dans le cas des systèmes monovariables. D'après l'équation Eq. 5-10, la marge de module est égale à l'inverse de la norme H_{∞} de la fonction de sensibilité. Or d'après le théorème du petit gain, si $||S||_{\infty} \leq \beta$ alors le système (S, Δ) est stable pour toute incertitude Δ telles que $||\Delta(j\omega)||_{\infty} < \beta$. En posant $\beta = \Delta M$ avec ΔM qui représente la marge de module, on a ces deux inégalités qui sont vérifiées.

Dans le cas des systèmes monovariables, il est possible de permuter le produit de deux fonctions de transfert sans modifier le résultat final (GK = KG). Cette propriété n'est, en général, pas vraie dans le cas des systèmes multivariables $(GK \neq KG)$. La conséquence est qu'il est possible de définir plusieurs fonctions de sensibilité dans le second cas :

- ✓ **Sensibilité** en entrée $S_u = (I + KG)^{-1}$, en sortie $S_v = (I + GK)^{-1}$
- ✓ Sensibilité complémentaire en entrée $T_u = (I + KG)^{-1}GK$, en sortie $T_y = (I + GK)^{-1}GK$

avec $S_u + T_u = I$, $S_v + T_v = I$ et $GS_u = S_v G$

Remarque : Dans le cas SISO, $S_u = S_y = S$ et $T_u = T_y = T$ alors qu'en général dans le cas MIMO, $S_u \neq S_v$ et $T_u \neq T_v$.

Il est possible de définir un certain nombre de classes d'incertitude (Annexe 4). Pour chaque classe d'incertitudes présentées, est indiquée (la matrice de) la fonction(s) de transfert correspondante(s) pour l'application du théorème du petit gain. L'examen de la valeur de la norme H_{∞} des fonctions de transfert en boucle fermée permet d'évaluer différentes marges de stabilité, suivant le type d'incertitude considéré, aussi bien dans le cas des systèmes monovariables que dans le cas des systèmes multivariables.

Remarque : Dans le cas des systèmes monovariables, assurer la robustesse par rapport à des incertitudes en entrée du système revient à assurer la robustesse par rapport à des incertitudes en sortie du système. Dans le cas des systèmes multivariables, ce n'est pas toujours vrai. Pour l'étude de la robustesse des systèmes multivariables, il est impératif d'étudier à la fois les marges en entrée et en sortie du système.

D'autre part, dans le théorème du petit gain (Théorème 5-1), la « *taille* » de l'incertitude est mesurée par un paramètre $\beta > 0$, indépendant de la pulsation $\omega \left(|\Delta(j\omega)| \le \beta \right)$. Ce mode de représentation de l'incertitude est donc très limité. En effet, il est clair qu'un modèle, qu'il soit obtenu par identification et/ou modélisation (physique), ne reflète qu'une partie des dynamiques du système modélisé. Dans le cas des systèmes linéaires stationnnaires, cela consiste à dire que la fonction de transfert associée n'est représentative du système physique que dans une certaine gamme de pulsations. Par suite, l'incertitude liée à la modélisation $\Delta(j\omega)$ présente une taille dépendante de la pulsation ω . Cette « *taille* » peut être définie par une fonction de transfert $W^i(j\omega)$ stable, appelée *pondération* et telle que $\forall \omega, |G_{réel}(j\omega) - G_{mod}(j\omega)| = |\Delta(j\omega)| \le |W^i(j\omega)|$. Cette écriture revient à définir l'ensemble des incertitudes comme l'ensemble des $\Delta(j\omega) = W^i(j\omega)\widetilde{\Delta}(j\omega), \forall \omega$ avec $|\widetilde{\Delta}(j\omega)| \le 1$ (soit $||\widetilde{\Delta}||_{\infty} \le 1$).

Dans le cas des systèmes multivariables, il peut être nécessaire d'introduire deux matrices de fonctions de transfert $W_1^i(j\omega)$ et $W_2^i(j\omega)$ pour définir l'ensemble des incertitudes comme l'ensemble des matrices de fonctions de transfert Δ telles que $\Delta = W_1^i \widetilde{\Delta} W_2^i$ avec $\|\widetilde{\Delta}\|_{\infty} \leq 1$. Ceci permet de déduire du théorème du petit gain (Théorème 5-1) le corollaire suivant :

Théorème 5-2 (Théorème du petit gain avec pondérations) La famille de systèmes bouclés décrits (Figure 5-12b) est stable pour toutes les fonctions de transfert stables Δ telle que $\Delta = W_1^i \widetilde{\Delta} W_2^i$ avec $\|\widetilde{\Delta}\|_{\infty} \leq 1$ si seulement si $\|W_1^i M W_2^i\|_{\infty} < 1$.

5.3.3 LA SYNTHESE H_{∞}

Historiquement, l'approche H_{∞} est née d'essais de prise en compte a priori d'objectifs de robustesse lors d'une synthèse. Cette vision s'est trouvée rapidement limitée à des descriptions grossières d'incertitudes de modèle, qui ne permettent pas de prendre en compte la nature physique des incertitudes. Une vision plus réaliste est de considérer cette approche comme une façon particulière de calculer un correcteur, sans que toutes les demandes de performances et de robustesse soient prises en compte a priori.

La synthèse H_{∞} prend une place de plus en plus importante parmi les méthodes de calcul de correcteur. Sa principale caractéristique est de permettre de modeler différents transferts d'un système asservi, tout en garantissant la stabilité de la boucle fermée. Elle permet également la prise en compte de certains objectifs de robustesse, tels que la garantie de marges de stabilité ou la robustesse aux dynamiques hautes fréquences mal connues ou non modélisées.

5.3.3.1 Outils de calcul nécessaire à la synthèse H_{∞}

a) Valeurs singulières d'une matrice de transfert

Considérons un système linéaire invariant avec un vecteur d'entrée e(t) et un vecteur de sortie s(t) de dimensions respectives m et p. Soit G(s) sa matrice de transfert. En réponse à une excitation harmonique $e(t)=E e^{j\omega t}$, $E \in C^m$, la sortie du système s'écrit :

Pour un système monovariable, on définit à partir de cette relation le gain du système à la pulsation ω par le module $|G(j\omega)|$. Dans le cas multivariable, on utilise la notion de valeurs singulières, définies comme les racines carrées des valeurs propres de $G(j\omega)$ multipliée par sa transconjuguée :

$$\sigma_{i}(G(j\omega)) := \sqrt{\lambda_{i}(G(j\omega)G(-j\omega)^{T})} = \sqrt{\lambda_{i}(G(-j\omega)^{T}G(j\omega))}$$

$$i = 1, min(m, p)$$

Eq. 5-15

Les valeurs singulières étant des nombres réels positifs ou nuls, elles peuvent être classées. On notera $\overline{\sigma}(G(j\omega))$ la plus grande valeur singulière et $\underline{\sigma}(G(j\omega))$ la plus petite :

$$\overline{\sigma}(G(j\omega)) = \sigma_1(G(j\omega)) \ge \sigma_2(G(j\omega)) \ge \dots \ge \underline{\sigma}(G(j\omega)) \ge 0$$
 Eq. 5-16

Remarque : pour un système monovariable, il n'existe qu'une valeur singulière, qui est donnée par :

$$\overline{\sigma}(G(j\omega)) = \underline{\sigma}(G(j\omega)) = | G(j\omega) |$$
 Eq. 5-17

En utilisant les propriétés suivantes des valeurs singulières (avec A matrice complexe de dimension $p \times m$),

$$\overline{\sigma}(A) = \max_{x \in C^{m}} \frac{\|Ax\|_{2}}{\|x\|_{2}} \text{ et } \underline{\sigma}(A) = \min_{x \in C^{m}} \frac{\|Ax\|_{2}}{\|x\|_{2}}$$
Eq. 5-18

On peut écrire que :

$$\underline{\sigma}(G(j\omega)) \leq \frac{\left\|G(j\omega)Ee^{j\omega t}\right\|_{2}}{\left\|Ee^{j\omega t}\right\|_{2}} \leq \overline{\sigma}(G(j\omega))$$
 Eq. 5-19

Les valeurs singulières $\sigma_i(G(j\omega))$ constituent donc une généralisation aux systèmes multivariables de la notion de gain. Elles peuvent être représentées dans le plan de Bode (Figure 5-13). Pour un système multivariables, le « gain » à une fréquence donnée dépend du vecteur complexe E, et sera compris entre les valeurs singulières inférieures et supérieures.



Figure 5-13 : Valeurs singulières et norme H_{∞} d'une matrice de transfert (G. Duc et S. Font, 1999)

b) Norme H_{∞} d'un système linéaire invariant

Soit un système linéaire invariant décrit par la représentation d'état :

$$\begin{cases} \dot{x}(t) = A x(t) + B u(t) \\ y(t) = C x(t) + D u(t) \end{cases}$$
 Eq. 5-20

A laquelle correspond la matrice de transfert $G(s)=C(sI-A)^{-1}B+D$. Nous posons l'hypothèse que le système est stable. L'ensemble des matrices de transfert G(s) correspondant à un système stable est noté usuellement $\Re H_{\infty}$.

Pour toute matrice G(s) dans $\Re H_{\infty}$, on définit une norme notée $\|G(s)\|_{\infty}$ et qui est appelée norme H_{∞} . Celle-ci est calculée de la manière suivante :

$$\|G(s)\|_{\infty} := \sup_{\omega \in \mathfrak{N}} \overline{\sigma}(G(j\omega))$$
Eq. 5-21

 $||G(s)||_{\infty}$ est donc la valeur la plus élevée du gain du système sur l'ensemble des pulsations (pour un système monovariable, c'est la valeur la plus élevée de $|G(j\omega)|$). Sur la base de la définition Eq. 5-21, on peut obtenir facilement une borne inférieure de $||G(s)||_{\infty}$ en cherchant la valeur la plus élevée du 2^{ème} membre de l'équation Eq. 5-21 pour un ensemble de valeur de ω choisies a priori. Mais si celui-ci présente un maximum très « pointu », on risque de sous-évaluer la norme H_{∞} .

Par ailleurs, la propriété suivante fournit un majorant γ de la norme H_{∞} :

Propriété 5-1 : Soit un réel positif $\gamma > \overline{\sigma}(D)$. Alors $||G(s)||_{\infty} < \gamma$ si et seulement si la matrice Hamiltonienne :

n'a pas de valeur propre sur l'axe imaginaire.

Pour déterminer la norme H_{∞} du système, il suffit alors de rechercher le plus petit γ tel que $\|G(s)\|_{\infty} < \gamma$. Pour cela, on peut effectuer une recherche linéaire sur le paramètre γ en faisant par exemple une dichotomie.

Une autre façon de procéder est de résoudre le problème d'optimisation suivant (voir annexe 03):

$$\min \gamma > 0$$

$$P = P^{T}, \gamma P > 0$$

$$\begin{bmatrix} A^{T}P + PA + C^{T}C & PB + C^{T}D \\ B^{T}P + D^{T}C & D^{T}D - \gamma^{2}I \end{bmatrix} < 0$$
Eq. 5-23

où on a les notations suivantes pour une matrice carrée A symétrique : A > 0 et A < 0signifient défini positive (toutes les valeurs propres de A sont à partie réelles positives) et défini négative (toutes les valeurs propres de A sont à partie réelles négatives). Chaque contrainte d'inégalité ainsi définie s'appelle une « *inégalité matricielle linéaire* » (en anglais, *LMI*, acronyme de *Linear Matrix Inequality*) (annexe 3). On obtient directement comme résultat la valeur de la norme H_{∞} du système G. Cette approche est cependant numériquement plus complexe que la précédente.

5.3.3.2 Le problème H_{∞} standard

La synthèse H_{∞} utilise la notion de problème standard, qui est présenté sur la Figure 5-14 : le vecteur *w* représente des entrées extérieures, telles que les signaux de référence, les perturbations, les bruits ; le vecteur *u* représente les commandes ; les signaux *e* sont choisis pour caractériser le bon fonctionnement de l'asservissement ; enfin *y* représente les mesures disponibles pour élaborer la commande.



Figure 5-14 : Problème H_w standard

La matrice de transfert P(s) modélise les interactions dynamiques entre deux ensemble d'entrées et deux ensembles de sorties, tandis que K(s) désigne le correcteur que l'on cherche à calculer.

Le système *P* admet pour équations d'état :

$$\dot{x}(t) = Ax(t) + B_{w}w(t) + B_{u}u(t)$$

$$e(t) = C_{e}x(t) + B_{ew}w(t) + B_{eu}u(t)$$
Eq. 5-24
$$y(t) = C_{y}x(t) + B_{yw}w(t) + B_{yu}u(t)$$

L'entier n est l'ordre de la représentation d'état. Dans le domaine de Laplace, les équations du système se réécrivent :

$$P(s) = \begin{bmatrix} P_{ew}(s) & P_{eu}(s) \\ P_{yw}(s) & P_{yu}(s) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} D_{ew} & D_{eu} \\ D_{yw} & D_{yu} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} C_e \\ C_y \end{bmatrix} (sI - A)^{-1} [B_w & B_u]$$
Eq. 5-25
$$\begin{bmatrix} E(s) \\ Y(s) \end{bmatrix} = P(s) \begin{bmatrix} W(s) \\ U(s) \end{bmatrix}$$
et $U(s) = K(s)Y(s)$

Ainsi, on calcule aisément la matrice de transfert entre *w* et *e* du système bouclé qui est appelée *Transformation Fractionnaire Linéaire* (LFT) inférieure :

$$E(s) = \underbrace{\left(P_{ew}(s) + P_{eu}(s)K(s)\left(I - P_{yu}(s)K(s)\right)^{-1}P_{yw}(s)\right)}_{\text{noté }P*K \text{ ou } F_{l}(P,K)} Eq. 5-26$$

Remarque : La notation * correspond au produit de Rhedeffer.

La synthèse H_{∞} du correcteur est définie par le problème suivant :

Problème H_{∞} *standard* :

- 1. Etant donné $\gamma > 0$, existe-il une loi de commande *K* telle que :
 - ✓ Le système bouclé P*K (Figure 5-14) soit asymptotiquement stable (tous les pôles du système en boucle fermée sont à partie réelle strictement négative).

$$\checkmark \quad \left\| F_l(P(s), K(s)) \right\|_{\infty} < \gamma$$

2. Si oui, construire une loi de commande *K* assurant pour le système en boucle fermée les deux propriétés précédentes.

Les correcteurs assurant la plus petite valeur de γ possible seront dits « optimaux ».

Deux approches peuvent être envisagées pour résoudre le problème H_{∞} standard. La première approche repose sur la résolution d'une série d'équations de Riccati. C'est la solution la plus simple et la plus fiable numériquement. Cependant, elle nécessite la vérification d'un certain nombre d'hypothèses qui peuvent être non vérifiées alors que le problème H_{∞} standard admet une solution. Une deuxième solution au problème H_{∞} standard permet de faire l'économie de ces hypothèses, au prix d'une complexité algorithmique accrue. Une telle approche est basée sur la résolution d'un problème d'optimisation convexe sous contraintes d'inégalités matricielles linéaires (LMIs).

Ces deux méthodes utilisent une représentation d'état de la matrice d'interconnexion P(s), donnée sous la forme suivante :

$$\begin{pmatrix} \dot{x}(t) \\ e(t) \\ y(t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A & B_w & B_u \\ C_e & D_{ew} & D_{eu} \\ C_y & D_{yw} & D_{yu} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x(t) \\ w(t) \\ u(t) \end{pmatrix}$$
Eq. 5-27

avec $x \in \mathfrak{R}^n$; $w \in \mathfrak{R}^{n_w}$; $u \in \mathfrak{R}^{n_u}$; $e \in \mathfrak{R}^{n_e}$; $y \in \mathfrak{R}^{n_y}$.

5.3.3.2.1 Résolution du problème H_{∞} standard par équations de Riccati

Cette méthode, aussi connue sous le nom d'algorithme de Glover-Doyle, est apparue à la fin des années 80 (Glover et Doyle, 1988 ; Doyle et al., 1989). Elle reste aujourd'hui la méthode de résolution la plus utilisée.

Soit $P = P^T$ et $Q = Q^T$ des matrices de même dimension que A. On note :

$$X = Ric \begin{pmatrix} A & -P \\ & \\ -Q & -A^{T} \end{pmatrix}$$
 Eq. 5-28

quand elle existe, la solution symétrique de l'équation de Riccati :

$$XA + ATX - XPX + Q = 0$$
 Eq. 5-29

telle que toutes les valeurs propres de A-PX ont une partie réelle strictement négative.

Le problème H_{∞} standard admet une solution si les quatre hypothèses suivantes sont vérifiées. Toutefois, seules les trois dernières sont liées à l'approche choisie qui est basée sur la résolution des équations de Ricatti.

*H*1) La paire (A, B_u) est stabilisable et (C_y, A) est détectable : hypothèse classique de toute méthode de synthèse utilisant les variables d'état (commande modale ou LQG par exemple) : elle est nécessaire pour obtenir la stabilité du système bouclé.

*H*2) $rang(D_{eu})=n_u$ et $rang(D_{yw})=n_u$: ce sont des conditions suffisantes pour assurer que la loi de commande K(s) est propre. De façon implicite, cela veut dire aussi qu'il y a au moins autant de sorties commandées *e* que de commande u ($n_e \ge n_u$) et qu'il y a au moins autant d'entrées de critères *w* que de mesures y ($n_w \ge n_y$)

H3)
$$\forall \omega \in R \ rang \begin{pmatrix} A - j\omega I_n & B_u \\ & & \\ C_e & D_{eu} \end{pmatrix} = n + n_u$$
: garantit que le transfert $P_{eu}(s)$ n'a pas

de zéros sur l'axe imaginaire (mais la réciproque n'est pas vraie si la représentation d'état utilisée pour décrire $P_{eu}(s)$ n'est pas minimale).

H4)
$$\forall \omega \in R \ rang \begin{pmatrix} A - j\omega I_n & B_y \\ & & \\ C_y & & D_{yw} \end{pmatrix} = n + n_y$$
: garantit que le transfert $P_{yw}(s)$ n'a pas

de zéros sur l'axe imaginaire.

Ces hypothèses doivent être impérativement vérifiées. Il est toujours possible, en appliquant une série de transformations au système Eq. 5-27 (Dayley, 1991 ; Safonov et al., 1989 ; Zhou et al., 1996) de se ramener au cas où les conditions suivantes sont vérifiées :

$$D_{ew} = 0 \qquad D_{eu}^{T} \left(C_{e} \qquad D_{eu} \right) = \left(0 \qquad I_{n_{u}} \right)$$
$$D_{yu} = 0 \qquad \begin{pmatrix} B_{w} \\ D_{yw} \end{pmatrix} D_{yw}^{T} = \begin{pmatrix} 0 \\ I_{n_{y}} \end{pmatrix} \qquad \text{Eq. 5-30}$$

Le théorème suivant permet de tester la faisabilité du problème standard :

Théorème 5-3 : Sous les hypothèses H1-H4 et les conditions Eq. 5-30, le problème H_{∞} standard à une solution si et seulement si les cinq conditions suivantes sont remplies :

1. La matrice hamiltonienne $H_{\infty} = \begin{pmatrix} A & \gamma^2 B_w B_w^T - B_u B_u^T \\ -C_e^T C_e & -A^T \end{pmatrix}$ n'a pas de valeur

propre sur l'axe imaginaire ;

2. Il existe une matrice $X_{\infty} = Ric(H_{\infty}) \ge 0$;

3. La matrice hamiltonienne $J_{\infty} = \begin{pmatrix} A^T & \gamma^2 C_e C_e^T - C_y^T C_y \\ -B_w B_w^T & -A \end{pmatrix}$ n'a pas de valeur propre

sur l'axe imaginaire ;

- 4. Il existe une matrice $Y_{\infty} = Ric(J_{\infty}) \ge 0$;
- 5. $\rho(X_{\infty}Y_{\infty}) < \gamma^2$ où $\rho(\cdot)$ désigne le module de la plus grande valeur propre (rayon spectral).

Enfin la solution du problème standard est donnée par le théorème suivant :

Théorème 5-4: Sous les conditions du *Théorème 5-3*, les correcteurs rationnels K(s) stabilisant le système et satisfaisant $||F_i(P(s),K(s))||_{\infty} < \gamma$ sont décrit par la LFT :

$$K(s) = F_l(K_a(s), \Phi(s))$$
 Eq. 5-31

où $\Phi(s) \in RH_{\infty}$ est une matrice de transfert de dimension $n_u \times n_y$ vérifiant $\|\Phi(s)\|_{\infty} < \gamma$, et $K_a(s)$ est décrit par la représentation d'état suivante :

$$\begin{pmatrix} \dot{x}_a(t) \\ u(t) \\ u_a(t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \hat{A}_{\infty} & -Z_{\infty}L_{\infty} & Z_{\infty}B_u \\ F_{\infty} & 0 & I_{n_u} \\ -C_y & I_{n_y} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x(t) \\ y(t) \\ y_a(t) \end{pmatrix}$$
Eq. 5-32

avec

$$\hat{A}_{\infty} = A + \gamma^{-2} B_{w} B_{w}^{T} X_{\infty} + B_{u} F_{\infty} + Z_{\infty} L_{\infty} C_{y}$$
Eq. 5-33
$$F_{\infty} = -B_{u}^{T} X_{\infty}$$
$$L_{\infty} = -Y_{\infty} C_{y}^{T}$$
$$Z_{\infty} = \left(I_{n} - \gamma^{-2} X_{\infty} Y_{\infty}\right)$$

En particulier, le correcteur correspondant à $\Phi(s)=0$, appelé correcteur central, admet la représentation d'état :

$$\left(\frac{\dot{x}c(t)}{u(t)}\right) = \left(\frac{\hat{A}\infty}{F_{\infty}} - Z_{\infty}L_{\infty}\right) \left(\frac{xc(t)}{y(t)}\right)$$
Eq. 5-34

La mise en œuvre de cette solution consiste à utiliser tout d'abord les résultats du Théorème 5-3 pour approcher la valeur optimale de γ par dichotomie (procédure appelée couramment « γ -itération »). On calcule ensuite le correcteur central en appliquant le Théorème 5-4.

Remarques :

- 1. L'ordre du correcteur est de n, c'est-à-dire l'ordre de P(s) soit le système à commander G(s) augmenté des différentes pondérations (éventuellement) introduites.
- 2. On peut essayer de rechercher le plus petit γ , noté γ_{opt} tel que le *problème* H_{∞} *standard* admette une solution à l'optimum.
- 3. La valeur γ_{opt} peut être approchée par dichotomie, en suivant le processus :

- a. Choix d'un niveau de tolérance ε et de deux valeurs γ_{inf} et γ_{sup} telles que, pour γ=γ_{sup}, le *problème H_∞ standard* admette une solution et que, pour γ=γ_{inf}, le problème H_∞ standard n'admette pas de solution ;
- b. On teste si pour $\gamma = \frac{\gamma_{sup} + \gamma_{inf}}{2}$, le *problème* H_{∞} standard admet une solution. Si oui alors $\gamma_{sup} = \gamma$ sinon $\gamma_{inf} = \gamma$;
- c. Si $(\gamma_{sup} \gamma_{inf}) > \varepsilon$ alors retourner à b.
- d. Calcul de la représentation d'état de la loi de commande permettant d'obtenir la norme H_{∞} proche de γ_{opt} .

5.3.3.2.2 Résolution du problème H_{∞} standard par LMI

Apparue plus récemment, la synthèse par *LMI* fournit une autre façon de résoudre le problème standard (Iwasaki & Skelton, 1994; Gahinet & Apkarian, 1994). Elle est plus générale, dans la mesure où elle nécessite pas le respect des hypothèses *H2-H4* (l'hypothèse *H1* reste nécessaire). L'exposé de cette méthode se limitera au cas où la condition :

$$D_{yu} = 0$$
 Eq. 5-35

est vérifiée. Dans le cas contraire, on résout tout d'abord le problème en considérant des mesures fictives \hat{y} correspondant à ce cas, et on modifie *a posteriori* le correcteur obtenu en effectuant le changement de variable $y = \hat{y} - D_{yu}u$ dans ses équations d'état.

La faisabilité du problème standard est testée au moyen du théorème suivant :

Théorème 5-5 : Sous l'hypothèse H1 et la condition Eq. 5-35, le problème H_{∞} standard a une solution si et seulement si deux matrices symétriques R et S existent, vérifiant les trois *LMI* suivantes :

$$\begin{pmatrix} N_{R} & 0 \\ 0 & I_{n_{w}} \end{pmatrix}^{T} \begin{pmatrix} AR + RA^{T} & RC_{e}^{T} & B_{w} \\ C_{e}R & -\gamma I_{n_{e}} & D_{ew} \\ B_{w}^{T} & D_{ew}^{T} & -\gamma I_{n_{w}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} N_{R} & 0 \\ 0 & I_{n_{w}} \end{pmatrix} < 0 \qquad \text{Eq. 5-36}$$

$$\begin{pmatrix} N_{S} & 0 \\ 0 & I_{n_{e}} \end{pmatrix}^{T} \begin{pmatrix} A^{T}S + SA & SB_{w} & C_{e}^{T} \\ B_{w}^{T}S & -\gamma I_{n_{w}} & D_{ew}^{T} \\ C_{e} & D_{ew} & -\gamma I_{n_{e}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} N_{S} & 0 \\ 0 & I_{n_{e}} \end{pmatrix} < 0 \qquad \text{Eq. 5-37}$$

$$\begin{pmatrix} R & I_{n} \\ I_{n} & S \end{pmatrix} \ge 0 \qquad \qquad \text{Eq. 5-38}$$

où N_R et N_S constituent une base de noyaux de $\begin{pmatrix} B_u^T & D_{eu}^T \end{pmatrix}$ et $\begin{pmatrix} C_y & D_{yw} \end{pmatrix}$ respectivement.

De plus, des correcteurs d'ordre r < n existent si et seulement si les *LMI* (Eq. 5-36, Eq. 5-37, Eq. 5-38) sont vérifiées par des matrices *R* et *S* qui permettent de satisfaire en plus la condition supplémentaire :

$$rang\begin{pmatrix} R & I_n \\ & \\ I_n & S \end{pmatrix} \le n+r \quad \Leftrightarrow \quad rang(I_n - RS) \le r \qquad \text{Eq. 5-39}$$

Dans cette formulation, les inégalités (Eq. 5-36, Eq. 5-37, Eq. 5-38) remplacent les conditions 1) à 5) du *Théorème 5-3*. On peut également rechercher directement la valeur optimale de γ , en résolvant le problème suivant, qui est un problème d'optimisation convexe :

$$\min_{R=R^{T}, S=S^{T}} \gamma \quad \text{sous (Eq. 5-36, Eq. 5-37, Eq. 5-38)}$$
Eq. 5-40

A partir des matrices R et S solutions des problèmes précédents, différentes procédures peuvent être envisagées pour former un correcteur : des formules explicites sont 279 données notamment dans (Iwasaki et Skelton, 1994 ; Gahinet, 1994), tandis que Gahinet et Apkarian (1994) proposent une résolution par LMI, qui peut être résumée comme suit.

Soit :

$$\begin{cases} \dot{x}_{c}(t) = A_{c}x_{c}(t) + B_{c}y(t) \\ u(t) = C_{c}x_{c}(t) + D_{c}y(t) \end{cases}$$
Eq. 5-41

avec $x_c \in \Re^r$, une représentation d'état du correcteur d'ordre $r \le n$ cherché.

Le système bouclé Fi(P(s),K(s)) a pour représentation d'état :

et, en vertu du « Bounded Real Lemma » (Boyd et al., 1994), sa norme H_{∞} est inférieure à γ si et seulement si, il existe une matrice $X = X^T > 0$ vérifiant :

$$\begin{pmatrix} A_f^T X + X A_f & X B_f & C_f^T \\ B_f^T & -\gamma I_{n_w} & D_f^T \\ C_f & D_f & -\gamma I_{n_e} \end{pmatrix} < 0 \qquad \text{Eq. 5-43}$$

qui est une inégalité matricielle bilinéaire en X, A_c , B_c , C_c , D_c . Une matrice X qui convient peut être obtenue en effectuant une décomposition en valeurs singulières de $I_n - RS$, d'où on déduit deux matrices $M, N \in \Re^{n \times r}$ de rang plein vérifiant :

$$MN^{T} = I_{n} - RS$$
 Eq. 5-44

qui permettent de déterminer :

$$X = \begin{pmatrix} S & N \\ \\ N^{T} & -M^{+}RN \end{pmatrix}$$
 Eq. 5-45

où M^+ désigne la pseudo-inverse de $M(M^+M=I_r)$.

L'inégalité Eq. 5-43 est alors une LMI en A_c, B_c, C_c, D_c , dont la résolution fournit donc un correcteur.

Enfin la condition Eq. 5-39 semble suggérer la possibilité de synthétiser des correcteurs d'ordre inférieur à l'ordre de la matrice d'interconnexion P(s). Il est toutefois exceptionnel que la condition Eq. 5-39 soit spontanément remplie. La recherche de correcteurs d'ordre réduit solution du problème standard pour une valeur donnée de γ amène donc à considérer le problème suivant :

$$\min_{R=R^{T}, S=S^{T}} rang(I_{n}-RS) \quad \text{sous (Eq. 5-36, Eq. 5-37, Eq. 5-38)}$$
Eq. 5-46

A la différence du problème Eq. 5-40, ce problème n'est pas convexe. Différentes possibilités ont été examinées pour tenter de le résoudre (Gahinet et Ignat, 1994 ; David et De Moor, 1994 ; Iwasaki et Skelton, 1995 ; ElGahoui et al., 1997), sans garantie de convergence vers le minimum global.

5.4. <u>APPLICATION DE LA COMMANDE H_∞ SUR LE PROCEDE</u> <u>D'EXTRUSION</u>

Après avoir présenté la synthèse H_{∞} standard, nous allons dans cette section appliquer cette technique de commande sur le modèle linéaire du procédé d'extrusion afin de synthétiser une loi de commande pour réguler la qualité du polymère via la viscosité. Le choix de la variable de commande s'est porté sur la viscosité car elle est étroitement liée à la taille des chaînes du polymère qui reflète la qualité du polymère (rigide, souple,...). Les objectifs de la commande sont l'obtention d'un système bouclé stable et un suivi de trajectoire en viscosité via un modèle de référence.

Le schéma bloc de la Figure 5-15 illustre la mise sous forme standard du problème de synthèse H_{∞} .



Figure 5-15 : Mise sous forme standard du problème de commande

Dans ce schéma (Figure 5-15) « *Modèle ref* » représente le modèle de référence que la sortie doit suivre. La synthèse de la loi de commande a été élaborée par rapport à deux modèles de référence caractérisés par des fonctions de transfert du premier ordre (Tableau 5-1). Le choix de ces fonctions est basé sur le temps de réponse qui est largement inférieur à celui du système en boucle ouverte.

Modèle de référence	Temps de réponse
$H_{ref1} = \frac{0.04}{s + 0.04}$	<i>Temps de réponse = 75 s</i>
$H_{ref 2} = \frac{0.07}{s + 0.07}$	Temps de réponse = 42.83 s

Tableau 5-1 : Modèles de références

Un filtre passe bas du second ordre a été rajouté dans la boucle pour assurer les objectifs de précision. Le tracé de bode de ce filtre est représenté sur la Figure 5-16.



Figure 5-16 : Tracé de bode du filtre passe bas

La résolution du problème standard H_{∞} a été réalisé en utilisant la fonction « *hinfric* » du logiciel de simulation Matlab[®]. Cette fonction est basée sur la méthode de résolution par équations de Riccati du problème de la synthèse H_{∞} 5.3.3.2.1).

5.4.1.1 Simulations

Différentes simulations ont été réalisées en appliquant un échelon d'environ 10 % par rapport à la valeur de la viscosité à l'équilibre en imposant un suivi de trajectoire avec les modèles de référence cités dans le Tableau 5-1. La loi de commande élaborée est appliquée sur le modèle linéarisé et sur le modèle complet non linéaire au voisinage du domaine de fonctionnement.

Les modèles (linéaire et non linéaire) utilisés pour la synthèse de la loi de commande sont des modèles de type MIMO (8×8). Les différentes variables d'entrée et de sortie des deux modèles sont présentées dans le Tableau 5-2 :

Variables d'entrée	Variables de sortie
Vitesse de rotation des vis N	Viscosité de la matière au niveau de la filière η_{fil}
Débit d'alimentation F_0	<i>Température matière au niveau de la vis inverse</i> T_{inv}^m
Rapport $[M_0]/[I_0]$	<i>Température des fourreaux</i> T_i^f , $i=1,5$
Les puissances de chauffe des fourreaux ϕ_i , $i=1,5$	<i>Température matière au niveau de la filière</i> T_{fil}^m

Tableau 5-2 : Variables d'entrée et de sortie prises en compte lors de la synthèse de la loi de commande

L'avantage de la loi de commande que nous avons élaborée se manifeste par le fait qu'elle se base sur un modèle (linéaire et non linéaire) complet incluant les différentes variables d'entrée et de sortie du procédé avec une prise en compte des interactions existantes entre-elles. En effet, les différentes lois de commande trouvées dans la littérature utilisent essentiellement des modèles très simplistes par exemple des fonctions de transfert (premier ordre, second ordre avec ou sans retard,..). Ces modèles sont généralement de type SISO (mono-entrée, mono-sortie) impliquant une représentation très limitée du procédé. Les lois de commande issues de ces modèles ont une validité sur un domaine de fonctionnement très restreinte.

Dans ce qui va suivre, nous allons présenter les différents résultats de simulation obtenus avec la loi de commande élaborée pour chaque modèle de référence. Une comparaison entre le modèle linéaire et non linéaire est illustrée afin de valider la loi de commande sur les deux modèles.

5.4.1.1.1 Modèle de référence n° 1

Le premier modèle de référence choisi pour le suivi de trajectoire est un système de premier ordre avec un temps de réponse de 75 s $(H_{ref1} = \frac{0.04}{s+0.04})$. Un échelon positif de consigne sur la viscosité (30 Pa.s) est appliqué en entrée du système bouclé. Les performances de la loi de commande en termes de suivi de trajectoire sont illustrées dans la

Figure 5-17. D'après cette figure, on observe que la loi de commande obtenue réalise un bon suivi que ce soit pour le modèle linéaire ou non linéaire. Ainsi, le pallier de *30 Pa.s* est atteint pour les deux modèles avec un temps de réponse de 75 s.



Figure 5-17 : Performance en termes de suivi de trajectoire (modèle de référence n° 2)

Les commandes obtenues avec cette loi sont présentées dans la Figure 5-18.



a) commande sur la vitesse

b) commande sur le débit



c) commande sur les puissances de chauffe (modèle

d) commande sur les puissances de chauffe (modèle



e) commande sur le rapport [M₀]/[I₀] Figure 5-18 : Commandes obtenues pour le modèle linéaire et non linéaire (modèle de référence n°1)

Une vue globale des résultats de simulation obtenus montre que la loi de commande agit pratiquement sur l'ensemble des variables d'entrée du système avec une sollicitation plus importante de la vitesse des vis et certaines puissances de chauffe. En effet, la vitesse des vis est une variable qui affecte considérablement la viscosité. Nous avons montré lors des différentes analyses réalisées que la vitesse des vis affecte la viscosité sous l'effet de deux paramètres : les dissipations visqueuses et le taux de cisaillement. Le fait de réduire la vitesse des vis implique une diminution des dissipations visqueuses (chute de la température matière) et du taux de cisaillement. Ces deux phénomènes ont pour conséquence l'augmentation de la viscosité. Ainsi, la vitesse de vis passe d'une valeur de 100 tr/min (1.66 tr/s) à une valeur d'environ 74 tr/min (1.23 tr/s) (Figure 5-18a). De plus, cette variable de commande présente l'avantage d'agir d'une manière instantanée tout le long de l'extrudeuse contrairement aux

autres variables qui présentent un temps de retard (débit d'alimentation et rapport $[M_0]/[I_0]$) ou une forte inertie (puissance de chauffe des fourreaux). D'un autre côté, on observe une chute de l'énergie de chauffe particulièrement en sortie de filière (fourreau n° 5). Cette chute a pour conséquence de faire baisser la température matière donc augmenter la viscosité.

Concernant le débit d'alimentation et le rapport $[M_0]/[I_0]$, on constate que le correcteur agit faiblement sur ces deux variables d'entrée. Avec une variation très faible, ces deux variables ont un effet limité voire nul sur la viscosité en sortie de filière. Par ailleurs, on remarque que les mêmes types de commandes sont générés pour le modèle linéaire et non linéaire.

L'inconvénient de cette loi de commande apparaît au niveau de la vitesse des vis où on constate une variation quasi instantanée de la vitesse des vis. Cette variation peut endommager les actionneurs d'où la nécessité d'imposer une variation graduelle en introduisant des pondérations de type filtre passe-haut.

5.4.1.1.2 Modèle de référence n° 2

Le second modèle de référence testé est donné par la fonction de transfert $H_{ref2} = \frac{0.07}{s+0.07}$ où le temps de réponse est de 42.83 secondes. La Figure 5-19 illustre l'évolution des différentes variables de commande lors de l'application de l'échelon.




c) commande sur les puissances de chauffe (modèle

d) commande sur les puissances de chauffe (modèle



e) commande sur le rapport [M₀]/[I₀] Figure 5-19 : Commandes obtenues pour le modèle linéaire et non linéaire (modèle de référence n°2)

D'après la Figure 5-19, on constate dans un premier temps l'existence d'un écart statique relativement grand entre certaines variables de commande du modèle linéaire et non linéaire. Ceci montre qu'on se rapproche d'une limite où le modèle non linéaire ne suit plus les commandes appliquées pour le modèle linéaire. Nous avons constaté que lorsqu'on impose un suivi de trajectoire avec un temps de réponse inférieur à 28 secondes, la loi de commande synthétisée sur le modèle linéaire n'est plus valable sur le modèle non linéaire. En effet, si on observe les deux modèles de référence on constate que plus le temps de réponse est faible plus la vitesse des vis est faible. Ainsi, la tendance générale qu'adopte la loi de commande pour suivre le modèle de référence en termes de temps de réponse est qu'elle fait diminuer en premier lieu la vitesse des vis sans varier le débit d'alimentation d'une manière significative.

La limite est atteinte lorsque la vitesse des vis devient très faible, dans cas de figure le modèle non linéaire est en dehors du domaine de fonctionnement et la loi de commande n'est plus valable.

Dans le cas de ce modèle de référence la limite n'est pas franchie et les performances sont assurées pour les deux modèles (linéaire et non linéaire) (Figure 5-20) même si dans le cas du modèle non linéaire on note l'apparition d'un écart en régime stationnaire de l'ordre de 0.66 *Pa.s*.



Figure 5-20 : Performance en termes de suivi de trajectoire (modèle de référence n° 3)

En résumé, on peut affirmer que la loi de commande élaborée est valable sur le modèle linéaire et non linéaire pour des modèles de suivi de trajectoire ayant une variation du temps de réponse qui varie entre 40 et 280 secondes. Dans le cas des temps de réponse très grands, la loi de commande n'arrive pas à trouver un correcteur qui permet de satisfaire les performances imposées.

Un autre point à signaler concerne les réponses très rapides de certaines variables de commande notamment la vitesse. Pour remédier à ce problème, il est nécessaire d'introduire des filtres passe-haut pour imposer une variation progressive des variables de commande.

5.4.1.2 Elaboration de la loi de commande sur le modèle réduit

En se basant sur l'analyse modale, nous avons élaboré un modèle réduit en éliminant cinq modes non influents sur le comportement entrées-sorties du système. Cette réduction a été réalisée d'une manière progressive en vérifiant la validité de la loi de commande sur le modèle réduit pour chaque mode éliminé. Ainsi, nous avons constaté qu'au delà de cinq modes supprimés, les sorties de commande n'étaient plus valides dans le sens où elles étaient en dehors du domaine de validité (vitesse négative, débit trop élevé, ...).

Dans cette section, nous avons utilisé le modèle réduit pour synthétiser la loi de commande avec un suivi de trajectoire de la viscosité selon le modèle de référence $H_{ref1} = \frac{0.04}{s+0.04}$ (temps de réponse 75 secondes).

Afin d'illustrer l'influence de la réduction de modèle sur la loi de commande, nous avons comparé les commandes obtenues avec le modèle linéaire complet et celles obtenus avec le modèle linéaire réduit (Figure 5-21). Ainsi, on note une variation plus significative de la commande en débit d'alimentation dans le cas du modèle linéaire réduit par rapport au modèle linéaire complet (Figure 5-21b). La variation du $[M_0]/[I_0]$ a aussi augmenté, toutefois elle reste faible donc sans une conséquence sur la viscosité. Pour les autres variables de commandes (vitesse de vis et puissances de chauffe), elles ont pratiquement la même évolution que ce soit dans le cas du modèle linéaire réduit ou complet.





c) commande sur les puissances de chauffe (modèle

d) commande sur les puissances de chauffe (modèle







e) commande sur le rapport $[M_0]/[I_0]$ Figure 5-21 : comparaison entre les commandes du modèle linéaire complet et du modèle linéaire réduit

(modèle de référence n°1)

La loi de commande élaborée a été appliquée à la fois sur le modèle linéaire réduit et sur le modèle non linéaire. Les résultats de simulation sont présentés dans la Figure 5-22.



c) commande sur les puissances de chauffe (modèle

linéaire réduit)

d) commande sur les puissances de chauffe (modèle non linéaire)



e) commande sur le rapport $[M_0]/[I_0]$

Figure 5-22 : Commandes obtenues pour le modèle linéaire réduit et non linéaire (modèle de référence n°1)

D'une manière générale, les mêmes commentaires cités précédemment peuvent être repris (variation faible du rapport $[M_0]/[I_0]$, suivi de trajectoire essentiellement régi par les commandes en vitesse et en puissances de chauffe,...). Ajouter à cela, le problème des variations brusque de certaines variables de commande (vitesse de vis, débit d'alimentation et le rapport $[M_0]/[I_0]$). D'autre part, on observe un léger écart statique entre les variables de commande du modèle non linéaire et du modèle linéaire réduit. Cet écart se répercute sur la sortie du modèle non linéaire où on remarque une faible erreur entre la sortie référence et celle du modèle non linéaire (Figure 5-23).



Figure 5-23 : Performance en termes de suivi de trajectoire (modèle de référence n° 1)

5.4.1.3 Elaboration de la loi de commande en utilisant les filtres

Nous avons vu dans les simulations présentées que la loi de commande élaborée génère des variations brusques au niveau de certaines variables de commande notamment la vitesse des vis et le débit d'alimentation. Pour remédier à ce problème nous avons introduit des filtres passe-haut sur ces deux variables pour imposer une évolution graduelle donc moins contraignante. Les variables de commande représentant les puissances de chauffe ont été appliquées sans rajout de filtre. Leur évolution n'impose pas l'utilisation de filtres.

Le schéma bloc caractérisant la mise sous forme standard du problème de synthèse H_{∞} avec pondération est présenté dans la Figure 5-24.



Figure 5-24 : Mise sous forme standard d'un problème avec pondération

Les deux filtres utilisés pour la pondération de la vitesse et du débit d'alimentation sont donnés respectivement par les fonctions de transfert suivantes :

✓
$$H_{PH}^{N} = \frac{10s+10}{s+100}$$
; (pondération de la vitesse des vis N)
✓ $H_{PH}^{F_{0}} = \frac{5000s+5\cdot10^{4}}{s+100}$; (pondération du débit d'alimentation F_{0})

Le tracé de bode des deux filtres passe-haut est représenté dans la Figure 5-25



Figure 5-25 : Tracé de bode des filtres : a) Filtre $H_{\it PH}^{\it N}\,$; b) $H_{\it PH}^{\it F_0}$

La synthèse de la loi de commande est élaborée à partir du modèle linéaire complet en imposant un suivi de trajectoire sur la viscosité selon le modèle de référence n°1.

Le résultat de simulation en termes de performance est présenté dans la Figure 5-26. On remarque que la sortie du modèle caractérisant la viscosité suit parfaitement la trajectoire imposée par le modèle de référence. Ceci montre que la loi de commande élaborée assure de bonnes performances en termes de suivi de trajectoire.



Figure 5-26 : Performance en termes de suivi de trajectoire pour le modèle linéaire (avec pondération)



D'autre part, les différentes commandes générées sont illustrées sur la Figure 5-27.



Figure 5-27 : Commandes obtenues pour le modèle linéaire (avec pondération)

On remarque sur la Figure 5-27 que la pondération des variables de commande (vitesse des vis et débit d'alimentation) a permis de contourner le problème des variations brusques constatées lors des simulations précédentes. On observe une évolution progressive sur l'ensemble des variables de commande. Toutefois, on remarque sur la Figure 5-27.a une sollicitation un peu rapide de la vitesse au départ de la simulation mais qui tend vite à varier progressivement par la suite. Globalement, on peut dire que l'ensemble des variables de commande sont sollicitées d'une manière plus ou moins importante. La vitesse des vis reste la variable la plus utilisée par la loi de commande pour atteindre les objectifs de performances imposés en termes de suivi de trajectoire. Par ailleurs, on constate que la contribution des puissances de chauffe est moins importante dans ce cas comparé aux simulations présentées précédemment. Ceci a permis à la variable caractérisant le rapport $[M_0]/[I_0]$ de contribuer d'une manière plus significative dans la loi de commande. L'évolution de cette variable (la Figure 5-27.c) est conforme à l'aspect théorique à savoir une augmentation du rapport $[M_0]/[I_0]$ entraîne une augmentation de la viscosité en sortie de filière.

L'application d'un échelon de 10 % de la valeur de la viscosité à l'équilibre (environ 30 *Pa.s*) génère des commandes qui rendent le modèle non linéaire non représentatif du modèle linéaire autour du point de fonctionnement. Par conséquent, le suivi en trajectoire n'est pas assuré. Ainsi, pour valider la loi de commande sur le modèle non linéaire nous avons appliqué un faible échelon sur la viscosité (3.5% de la valeur d'équilibre) afin de rester dans

le domaine de validation. Les performances en termes de suivi de trajectoire obtenues avec cette loi sont présentées sur la Figure 5-28.



Figure 5-28 : Performance en termes de suivi de trajectoire pour le modèle non linéaire (avec pondération)

On observe à travers la Figure 5-28 un léger décalage suivi d'un faible dépassement entre le modèle de référence et la sortie du modèle non linéaire. Cependant, on considère que les performances sont atteintes pour le modèle non linéaire.

Par ailleurs, l'introduction des pondérations lors de la synthèse de la loi de commande a permis d'éliminer le comportement abrupt de certaines variables de commande mais il a provoqué une limitation au niveau des performances de la loi de commande sur le modèle non linéaire dans le sens où l'intervalle de fonctionnement a été réduit. Les commandes obtenues pour le modèle non linéaire sont représentées sur la Figure 5-29.



Figure 5-29 : Commandes obtenues pour le modèle linéaire (avec pondération)

5.5. CONCLUSION :

Ce chapitre a été consacré à la commande du procédé d'extrusion. Dans un premier temps, nous avons mené une étude bibliographique sur la commande des procédés d'extrusion. Les différents travaux recensés concernent plus particulièrement le domaine agroalimentaire. L'enjeu économique que suscite la qualité des produits alimentaire en sortie de filière explique l'importance du contrôle dans ce domaine. Il ressort de cette étude que la commande des procédés d'extrusion reste une tâche délicate du fait des interactions et des fortes non linéarités que présente ce type de procédé. L'application des techniques de commande de type SISO s'avère inefficace. Les lois de commandes élaborées de type MIMO sont les plus aptes pour commander soit la température ou la qualité du produit. La plus part des travaux étudiés atteste ce constat. Le choix des variables de commande dépend en général de la variable qu'on désire commander. Par exemple, Kulshreshtha et al. (1995) indiquent que le débit d'alimentation est la variable la mieux adaptée pour la commande de la pression en sortie de filière en indiquant que la vitesse des vis est impropre pour être utilisée comme variable de contrôle. Par ailleurs, Singh et Mulvaney (1994) estiment que la vitesse des vis et le couple moteur sont des variables très intéressantes pour commander la température fourreau et la température matière. En effet, dans le cas de Kulshreshtha et al. (1995) la vitesse des vis est impropre pour la synthèse de la loi de commande car elle provoque un non minimum de phase au niveau de la pression en sortie de filière alors que pour le contrôle de la température le phénomène du non minimum de phase ne se produit pas (Singh et Mulvaney, 1994).

Dans un second temps, nous avons présenté l'élaboration d'une loi de commande pour la commande de la qualité du polymère. La synthèse H_{∞} a été choisie pour atteindre cet objectif. Les variables d'entrées choisies pour la commande du procédé sont la vitesse des vis, le débit d'alimentation, le rapport $[M_0]/[I_0]$ et les puissances de chauffe des fourreaux. La variable utilisée pour commander la qualité du polymère est la viscosité. Celle-ci est étroitement liée à la masse molaire moyenne en masse représentative de la qualité de polymère. D'autres variables de sortie ont été utilisées telles que la température matière en filière, la température fourreau,... mais la commande était uniquement orientée sur la viscosité. La synthèse H_{∞} a été réalisée avec un modèle de référence pour le suivi de la trajectoire en viscosité.

Deux modèles de référence ont été testés afin d'étudier l'influence du temps de réponse sur l'évolution des variables de commande. La loi de commande élaborée a été appliquée sur le modèle linéaire complet et le modèle non linéaire. Les premiers résultats obtenus montrent que les objectifs en termes de performances sont atteints. Le suivi de trajectoire est assuré pour les deux modèles de références testés. Les variables de commandes caractérisant la vitesse des vis et les puissances de chauffe sont les plus sollicités pour la commande de la viscosité. Par ailleurs, on constate que la réponse de certaines variables de commande est très abrupte. D'autre part, la synthèse H_{∞} a été appliquée sur le modèle linéaire réduit (voir chapitre 4) puis sur le modèle non linéaire. Les résultats obtenus sont satisfaisants

et un bon suivi de trajectoire est assuré. Cependant, l'inconvénient de la loi de commande obtenue est présent au niveau du comportement abrupt des variables de commande.

Pour contourner ce problème, nous avons pondéré les variables de commande caractérisant la vitesse des vis et le débit d'alimentation par des filtres passe-haut. Les résultats obtenus montrent que les commandes générées évoluent de manière graduelle et l'effet de la variation quasi instantanée est éliminé. Par ailleurs, nous avons constaté que la loi de commande générée ne fonctionnait pas sur le modèle non linéaire pour un échelon de viscosité de 10 % de la valeur d'équilibre. Il a fallu réduire cette valeur à 3% pour pouvoir valider la loi de commande sur le modèle non linéaire. Ainsi, une étude fréquentielle plus approfondie est nécessaire sur le choix des filtres afin d'assurer une commande à la fois valable sur le modèle linéaire est non linéaire sur une large gamme de fonctionnement.

L'objectif à long terme est la prise en compte d'une plage complète de fonctionnement par l'intermédiaire d'approches multi-modèles. Par ailleurs, le comportement thermique du procédé influence considérablement la qualité du produit en sortie de filière d'où la nécessité d'une commande à la fois sur la viscosité et sur les températures des fourreaux avec une prise en compte des différentes interactions.

CONCLUSION ET PERSPECTIVES

Conclusion et Perspectives

Le procédé de transformation qu'est l'extrusion bivis corotative fait intervenir des phénomènes de transferts de chaleur, de masse et de quantité de mouvement complexes. La qualité du produit en sortie de filière est conditionnée par son histoire thermique et mécanique au cours de son trajet dans l'extrudeuse. Le contrôle de la qualité passe alors par une compréhension des différents phénomènes mis en jeu au sein du procédé. Ceci nécessite l'obtention d'un modèle capable de traduire et de prédire le plus fidèlement possible le comportement du système par rapport aux différents variables d'action (vitesse des vis, débit d'alimentation, puissances de chauffe,...).

Dans le travail que nous venons de présenter, nous pouvons distinguer deux grandes parties : la première correspond à la modélisation du procédé d'extrusion réactive en machine bivis et la seconde concerne la commande de ce système. La première phase fut de loin la plus coûteuse en temps et en énergie. Cette difficulté est liée à la complexité du procédé d'extrusion qui nécessite la maîtrise de nombreux phénomènes (écoulement, thermique, réaction et rhéologie).

L'étude bibliographique menée sur la modélisation des procédés d'extrusion nous a permis d'élaborer une démarche de modélisation mixte reposant sur le couplage de l'aspect mécanique des milieux continus à celui du génie des procédés. La méthodologie que nous avons adoptée permet de répondre à nos objectifs à savoir l'élaboration d'un modèle dynamique global capable de prédire l'état de l'extrudeuse en fonction de la position longitudinale et du temps pour l'ensemble des variables d'état du procédé (températures, taux de remplissage, pression, viscosité,...). Ce travail était motivant car à notre connaissance aucun travail comparable n'a été réalisé sur la modélisation dynamique d'une réaction de polymérisation en extrudeuse bivis corotative. Cette étape liée à la modélisation du procédé d'extrusion réactive a fait l'objet d'une publication (Choulak et al., 2004).

La première phase de la modélisation concerne la représentation des écoulements le long de l'extrudeuse. Pour ce faire, une discrétisation spatiale de l'extrudeuse a été effectuée par le biais de réacteurs parfaitement agité continu (RCPA) avec reflux éventuel. Le RCPA représente l'élément de base sur lequel repose l'élaboration du modèle global. Les différents éléments du profil de vis (pas direct, pas inverse, bloc malaxeur et filière) ont pu être caractérisés par cet élément.

Le schéma d'écoulement intrinsèque à paramètres distribués, est approché par une cascade de réacteurs parfaitement agités avec reflux. Le calcul des débits circulants entre les différents réacteurs est réalisé sur la base d'un modèle simplifié des écoulements en prenant en compte la géométrie des vis (Booy, 1980). Le calcul du profil de pression est obtenu par la résolution d'un système d'équations algébriques. Le modèle d'écoulement obtenu est représenté par un système d'équations algébro-différentielles.

Une étape d'analyse et d'étude a été réalisée sur ce modèle en se basant sur les DTS expérimentales. Le but de cette étude est la détermination du nombre de réacteur nécessaire à la représentation du schéma d'écoulement. Par ailleurs, un ajustement de certains paramètres est nécessaire pour le calcul des débits dans les zones partiellement remplies. Cette étape d'analyse est suivie par une validation du modèle d'écoulement à travers l'étude des DTS expérimentales. Ce modèle permet alors de reproduire les DTS expérimentales pour différents débits d'alimentation et vitesses de vis. D'autres aspects du modèle d'écoulement ont été validés à travers des conclusions tirées dans la littérature comme l'influence de la viscosité sur les DTS ou bien l'influence du rapport F_0/N sur les DTS réduites.

La seconde étape de la modélisation consiste à modéliser les échanges de chaleur et l'évolution de la réaction le long de l'extrudeuse. Ceci a été réalisé en associant à chaque réacteur le morceau de fourreau et de vis correspondant à la zone de l'extrudeuse considérée. Le modèle thermique (matière, fourreau et vis) ainsi que le modèle de réaction ont été élaborés en écrivant le bilan d'énergie et le bilan matière par espèce pour chaque réacteur de la cascade. L'écriture des bilans (matière et énergie) permet de réaliser les différents couplages existants de manière naturelle (écoulement, comportement thermique, avancement de la réaction et rhéologie). Le développement du modèle global est obtenu en regroupant l'ensemble des bilans c'est-à-dire en combinant les différents sous-modèles afin d'avoir un comportement dynamique global de l'ensemble des paramètres du procédé. La polymérisation de l'ɛ-caprolactone a été choisie pour illustrer notre démarche de modélisation. Le mécanisme réactionnel de cette réaction est de type « coordination-insertion » et la polymérisation est vivante. L'amorceur est un organométallique, le tétrapropylorthotitanate, permettant d'obtenir des taux de conversion de 100% dans des conditions d'extrusion appropriées. Les lois rhéo-

cinétiques développées par Gimenez (1999) nous ont permis de modéliser cette réaction en tenant compte de l'augmentation importante de la viscosité sur les paramètres d'écoulement.

La notion de DTS a été utilisée pour valider le modèle d'écoulement cependant elle n'est pas assez riche en terme d'informations pour pouvoir l'exploiter lors de la validation du modèle global du procédé d'extrusion réactive. Celle-ci caractérise le modèle en régime permanent et autour d'un point de fonctionnement bien défini (conditions opératoires fixes). Une phase de validation plus complète reposant sur l'aspect qualitatif du comportement du modèle à la fois en régime statique et dynamique a été entreprise.

De ce fait, différentes simulations ont été effectuées pour valider dans un premier temps le comportement statique du modèle. Une analyse est alors réalisée sur quelques variables d'état du procédé notamment le taux de conversion, la viscosité, la température matière et la masse moléculaire moyenne en poids. Cette étude a été menée en faisant varier les paramètres d'entrée du procédé que sont : le débit d'alimentation, la vitesse des vis et le rapport $[M_0]/[I_0]$. La comparaison des premiers résultats de simulation avec les données de la littérature (Poulesquen, 2001) montre que le comportement statique du modèle global est cohérent avec les observations réalisées par Poulesquen notamment pour la variation du rapport $[M_0]/[I_0]$. Dans un second temps, une autre campagne de simulation a été menée afin d'étudier cette fois le comportement dynamique des variables d'état vis-à-vis de variations appliquées en entrée. Les résultats obtenus montrent que l'évolution temporelle des différentes variables est conforme à la tendance générale que peut avoir le comportement dynamique du procédé face à des variations appliquées en entrée que ce soit par rapport à une variation de la vitesse des vis, du débit d'alimentation où du rapport $[M_0]/[I_0]$. Par ailleurs, afin de consolider le comportement dynamique du modèle, des validations expérimentales ont été réalisées en comparant la pression expérimentale en sortie de filière à la pression simulée pour des échelons de la vitesse de vis et du rapport $[M_0]/[I_0]$. Les résultats obtenus montrent que le modèle traduit correctement les phénomènes transitoires qui apparaissent lors de la variation de la vitesse des vis (pic de pression) ou du rapport $[M_0]/[I_0]$ (augmentation de la pression en pallier). De plus, une dernière validation expérimentale a été vérifiée par rapport à l'influence que peut avoir l'injection d'un traceur (étude de DTS) sur l'évolution de la pression en sortie de filière. Les résultats de simulations ont alors confirmé les explications avancées par Poulesquen (2001) pour justifier l'apparition de ce phénomène qui est lié à une perturbation interne affectant intrinsèquement le rapport $[M_0]/[I_0]$.

L'étape suivante que nous avons entreprise consiste à élaborer un modèle de simulation linéaire moins complexe afin de synthétiser une loi de commande pour le contrôle de la qualité du polymère. Cette étape est précédée par une phase d'analyse du modèle non linéaire afin de négliger certains phénomènes dont la contribution est jugée limitée sur le comportement statique et dynamique du modèle. Cette phase d'analyse nous a permis de constater que la contribution des vis notamment dans les échanges thermiques n'influence pas d'une manière significative l'évolution de la température matière au sein de l'extrudeuse. L'autre point qui ressort de cette étude concerne les zones partiellement remplies. En effet, nous avons pu observer que le regroupement de certaines zones partiellement remplies était faisable moyennant quelques modifications afin de calculer les pas et les longueurs des zones regroupées. Ceci permet alors de réduire la taille et la complexité du modèle dynamique global sans altéré son fonctionnement.

Par le biais de la linéarisation du modèle global autour d'un point de fonctionnement, nous avons obtenu un modèle linéaire utilisable pour la synthèse de la loi de commande. Ce modèle comporte 8 variables d'entrée (le débit d'alimentation F_0 , la vitesse des vis N, le rapport $[M_0]/[I_0]$ et les résistances de chauffe $\phi_i i=1...5$) et 8 variables de sortie (viscosité au niveau de la filière η_f , température matière en vis inverse (T_{inv}^m) et en filière (T_{fil}^m) et les températures des fourreaux $(T_i^{f} i=1...5)$). Ce dernier a été validé en comparant son évolution dynamique et statique par rapport au modèle non linéaire face à des variations appliquées sur les variables d'entrée. Pour aller encore plus loin dans l'aspect analyse du modèle, nous avons introduit le concept de la « *simulation modale* » afin de réduire le modèle linéaire obtenu en éliminant les modes les moins influents sur le comportement entrées-sorties du système.

Enfin la dernière étape de ce travail a été consacrée à la commande du procédé d'extrusion réactive via le contrôle de la qualité du polymère en sortie de filière. Le choix de la variable de commande s'est porté sur la viscosité car elle est fortement liée à la masse moléculaire moyenne en poids qui donne une idée sur la taille des chaînes du polymère ellemême représentative de la qualité de polymère (rigide, souple,...). La synthèse H_{∞} a été appliquée pour atteindre cet objectif. Ce chapitre peut être considéré comme une prè-étude à une phase de commande en ligne du procédé d'extrusion réactive.

Les résultats de simulation obtenus avec la loi de commande élaborée montrent que la vitesse des vis et les résistances de chauffe sont les variables les plus sollicités pour la commande de la viscosité. En effet, la vitesse des vis agit instantanément sur l'ensemble des variables d'état du procédé sans l'apparition d'un temps de retard. De plus, elle influence considérablement l'évolution de la viscosité via les dissipations visqueuses et le taux de cisaillement. De même, le fait d'agir simultanément sur l'ensemble des résistances de chauffe du procédé affecte la température matière qui à son tour modifie l'évolution de la viscosité. La loi de commande ainsi développée a été appliquée à la fois sur le modèle linéaire réduit, le modèle linéaire complet et le modèle non linéaire autour du point de fonctionnement. Par ailleurs, certaines variables d'entrée varient de manière brusque ce qui caractérise un inconvénient majeur si on cherche à implémenter la loi de commande sur le procédé réel. Des filtres ont alors été rajoutés lors de la synthèse afin de rendre l'évolution des variables d'entrée notamment la vitesse des vis et le débit d'alimentation moins abrupte. L'objectif désiré a été atteint avec l'ajout des filtres lors de la synthèse de la loi de commande. Une évolution graduelle de la vitesse des vis et du débit d'alimentation est alors observée lors de la validation de la loi de commande sur le modèle linéaire. Toutefois, nous avons constaté que la loi de commande obtenue n'était valable sur le modèle non linéaire que pour des échelons ne dépassant pas 5% de la valeur de la viscosité à l'équilibre.

En résumé, les travaux de cette thèse ont permis d'aboutir à la mise au point d'un modèle dynamique du procédé d'extrusion réactive capable de prédire l'évolution de l'ensemble des variables d'état du procédé (taux de remplissage, pression, taux de conversion, températures, ...) face à des variations sur les variables d'entrée (le débit d'alimentation, la vitesse des vis, le rapport $[M_0]/[I_0]$ et les résistances de chauffe). Ce modèle a par la suite été utilisé pour l'obtention d'un modèle linéaire permettant d'élaborer une loi de commande pour le contrôle de la qualité du polymère. Certes, des améliorations peuvent être apportées au niveau de la commande du procédé mais cela à permis néanmoins d'ouvrir un champ de travail théorique et expérimental visant à envisager une mise en œuvre pratique de la commande.

Enfin, certains points de ce travail peuvent être améliorés au niveau des différents sous-modèles :

Le modèle d'écoulement : faire une étude plus approfondie sur le calcul des coefficients permettant le calcul des débits internes (direct et reflux) le long de l'extrudeuse. Cette amélioration peut se faire en utilisant la notion de DTS locales. Celles-ci vont nous permettre de cibler les zones du profil de vis jugées importants à savoir les blocs malaxeurs ou les vis inverses.

- Le modèle thermique : son amélioration passe par une instrumentation plus fine de l'extrudeuse pilote en installant des capteurs thermiques dans les zones sensibles du profil de vis (vis inverse, bloc malaxeur, filière). Ceci permettra d'affiner les calculs par une identification ciblée des coefficients d'échange de chaleur.
- ► Le modèle de réaction : l'amélioration qu'il faut apporter se situe au niveau du calcul de l'ordre apparent par rapport à l'amorceur (α_c). Ce dernier dépend fortement de la température et affecte considérablement le comportement rhéologique et la cinétique de la réaction d'où la nécessité d'un modèle reliant ce coefficient à la température.
- La commande : utiliser l'approche multi-modèles pour élargir le domaine de fonctionnement et proposer d'autres lois de commande en régulant à la fois les températures des fourreaux et la viscosité vu leur influence sur la qualité du produit en sortie de filière. Enfin, implémenter la loi de commande élaborée sur le procédé pilote.

REFERENCES BIBLIOGRAPHIQUES

Références bibliographiques

Agassant J.F., Avenas P., Sergent J. P., Vergnes B. & Vincent M., - La mise en forme des matières plastiques -, *Technique et Documentation Lavoisier*, Paris, (1996)

Auder A., -Etude des écoulements et réactions chimiques en extrudeuse bivis. Approche expérimentale : Utilisation de la distribution des temps de séjours-, Thèse de doctorat, Université « jean Monnet » de Saint-Etienne, (1996)

Barrès C. & Vergnes B., in: -Processing and quality of foods-, Vol. 1, Elsevier, Londres, 1990.

Beran E., Vandenberghe L. & Boyd S., -A global BMI algorithm based on the generalised bender decomposition-, *In Proc. Of ECC*, Brussels, Belgique, (1997)

Berzin F., **-Etude expérimentale et modélisation d'une opération d'extrusion réactive**-, Thèse de doctorat, Ecole des Mines de Paris, (1998)

Berzin F., Vergnes B., Dufossé P. & Delamare L., -Modelling of peroxide initiated controlled degradation of polypropylene in a twin screw extruder-, *Polym. Eng. Sci.*, 40, p. 344-356, (2000)

Booy M.L., -Geometry of fully wiped twin screw equipment-, *Polym. Eng. Sci.*, 40, p. 973-984, (1978)

Booy M.L., -Isothermal flow of viscous liquids in corotating twin screw devices-, *Polym. Eng. Sci.*, 20, p. 1220-1228, (1980)

Boyd S., ElGhaoui L., Feron E. & Balakrishnan V., -Linear matrix inequalities in systems and control theory-, volume 15 of *Applied Mathematics*. Philadelphia, PA: SIAM, June (1994)

Bur A. J. & Gallant F. M., -Fluorecence Monitoring of Twin Screw Extrusion-, *Polym. Eng. Sci.*, 24, p. 1365-1371, (1991)

Cassagnau P., Mijangos C. & Michel A., -An ultraviolet method for determination of the residence time distribution in a twin screw extruder-, *Polym. Eng. Sci.*, 31, n° 11, p. 772-778, (1991)

Cassagnau P., -**Modification chimique des polymères en extrudeuse**-, Habilitation à diriger des recherches, Université « Claude Bernard » Lyon I, (1994)

Cayot N., Bounie D. & Baussard H., **-Dynamic modelling for a twin screw food extruder: Analysis of the dynamic behaviour through process variables-,** *J. of Food Eng.*, 25, n° 2, p. 245-260, (1995)

Chang K. L. B. & Halek G. W., -Analysis of shear and thermal history during co-rotating twin-screw extrusion-, *J. of Food Sci.*, 56, n° 2, p. 518-531, (1991)

Chang Z. & Tan J., -Determination of model structure for twin-screw food extrusion, Part I: Multi-loop-, *Transactions of the Institute of Chemical Engineers*, 71 (C), p.11-19, (1993a)

Chang Z. & Tan J., **-Determination of model structure for twin-screw food extrusion, Part I: Multi-variable-,** *Transactions of the Institute of Chemical Engineers*, 71 (C), p.20-26, (1993a)

Chen L. & Hu G. H., -Application of a Statistical Theory in Residence Time Distributions-, *AIChE Journal*, 39, n° 9, p. 1558-1562, (1993)

Chen L., Hu G. H. & Lindt J. T., -Acceleration of chemical reaction in reactive extrusion accompanied by devolatilization-, *ANTEC* '96, p. 295-304, (1996)

Chen Z. & White J. L., -Simulation of Non-isothermal Flow in Twin Screw Extrusion-, *Inter. Polym. Proc.*, vol. n° 9, p. 310-318, (1994)

Choulak S., Couenne F, Thoma G., Cassagnau P. & Michel A., -**Methodology for robust** control of pressure for *ɛ*-caprolactone polymerization in a twin-screw extruder-, *Chimia*, 55, n°3, p. 244-246, (2001)

Choulak S., Couenne F, Le Gorrec Y., Jallut C., Cassagnau P. & Michel A., -A generic dynamic model for simulation and control of reactive extrusion-, *Ind. Eng. Chem. Res.*, Article in press, (2004)

Chu L.-L. & Min K., -Non-newtonian and isothermal analysis of flow of poly(methyl methacrylate) in a model twin screw extruder. Part I-, *Polym. Eng. Sci.*, 34, p. 986-994, (1994a)

Chu L.-L. & Min K., -Non-newtonian and non-isothermal analysis of flow during polymerisation of methyl methacrylate in a model twin screw extruder. Part II -, *Polym. Eng. Sci.*, 34, p. 995-1004, (1994b)

David J. & De Moor B., -Designing Reduced Order Output Feedback Controllers Using a Potential Reducing Method-, *American Control Conf.*, pp. 845-849, Baltimore, Maryland, (1994)

Dayley R.L., -Lectures notes for the Workshop on H_{∞} and μ methods for robust control-, 30^{th} Conf. On Decision and Control, Bringhton, Angleterre, (1991)

De Graff R.A, Rohde M. & Janssen L.P.B.M, -A novel model predicting the residence-time distribution during reactive extrusion-, *Chem. Eng. Sci.*, 52, p. 4345-4356, (1997)

De Ruyck H., -Modelling of the residence time distribution in a twin screw extruder-, J. of Food Eng., 32, p. 375-390, (1997)

Delamare L., -Evolutions morphologiques d'un mélange de polymères incompatibles dans une extrudeuse bivis corotative-, Thèse de doctorat, Ecole des Mines de Paris (1995)

Della Valle G., Barrès C., Plewa J., Tayeb J. & Vergnes B., -Computer simulation of starchy products transformation by twin screw extrusion-, *J. Food Eng.*, 19, p. 1-31, (1993).

Doyle J.C., Glover K., Khargonekar P.K. & Francis B.A., -State-space solutions to standard H_2 and H_{∞} control problems-, *IEEE Trans. Autom. Control.*, AC 34 n°8, pp. 831-846, (1989)

Dubois Ph., Jacobs C., Jérôme R. & Teyssié Th., -MacomolecularEngineering of polylactones and polylactides Mechanism and Kinetics of lactide Homopolymerisation by Aluminium Isopropoxide-, *Macromolecules*, 24, p. 2266-2270, (1991)

Duc G. & Font S., -Commande H_{∞} et μ -analyse-, Hermès, (1999)

ElGahoui L., Oustry F. & AitRami M., -A cone complementary Linearization algorithm for static output feedback and related problems-, *IEEE Trans. Autom. Control*, AC 42 n°8, (1997)

Elzinga J. & Moore T.G., -A central cutting plane algorithm for the convex programming problem-, *Mathematical programming*, 8 n°2, pp. 134-145, April (1975)

Font S., Duc G. & Carrère F., -Commande fréquentielle robuste : Application aux paliers magnétiques-, Techniques de l'Ingénieur, traité informatique industrielle. R 7 432, (1997)

Gahinet P. & Ignat A. -Low-order H_{∞} synthesis via LMIs- American Control Conf., p. 1499-1500, Baltimore, Maryland, (1994)

Gahinet P. & Apkarian P., -A Linear Matrix Inequality Approach to H_{∞} Control-, Int. J. of Robust & Nonlinear Contr., 4, p. 421-448, (1994)

Gahinet P., -Explicit controller formulas for LMI-based H_{∞} synthesis-, American Control Conf., p. 2396-2400, Baltimore, Maryland, (1994)

Gahinet P., Nemirovski A., Laub A. & Chilali M. -LMI control toolbox-. The Math Works inc, (1995)

Ganzeveld K. J., Capel J. E., Van der wal D. J. & Janssen L. P. B. M., -The modelling of counter-rotating twin screw extruders as reactors for single-component reactions-, *Chem. Eng. Sci.*, 49, p. 1639-1646, (1993)

Gao J., Walsh G.C., & Bigio D., -Residence-time distribution model for twin-screw extruders-, *AIChE Journal*, 45, p. 2541-2549, (1999)

Gimenez J., Cassagnau P. & Michel A., -Bulk polymerization of ε -caprolactone: Rheological predictive laws-, J. of Rheology, 44, n° 3, p. 527-547, (New York) (2000a)

Gimenez J., Cassagnau P. Fulchiron R. & Michel A., **-Structure and dynamics of melt poly(e-caprolactone) from inverse rheological calculation-,** *Macromolecular Chemestery and physics*, 201, n° 5, p. 479-490, (2000b) Gimenez J., -Polymérisation de l'ɛ-caprolactone en extrudeuse : étude cinétiques et rhéologique en vue du contrôle du procédé-, Thèse de doctorat, Université « Claude Bernard » Lyon I, (1999)

Glover K. & Doyle J.C., -State-space formulae for all stabilizing controllers that satisfy an H_{∞} - norm bound and relations to risk sensitivity-, *Systems & Control letters*, 11, p. 167-172, (1988)

Haley T. A. & Mulvaney S. J., **-On-line system identification and control design of an extrusion cooking process: Part I. System identification-**, *Food Control*, 11, p. 103-120, (2000a)

Haley T. A. & Mulvaney S. J., -On-line system identification and control design of an extrusion cooking process: Part I. Model predictive and inferential control design-, *Food Control*, 11, p. 121-129, (2000b)

Hassibi A., How J., & Boyd S., -A path-following method for solving BMI problems in control-, *In Proc. Of ACC*, p. 1385-1389, San Diego, California, (1999)

Hofer J. M. & Tan J., **-Extrudate temperature control disturbance prediction**-, *Food Control*, 4, n°1, p. 17-24, (1993)

Hu G. H., Kadri I. & Picot C., **-On-line Measurement of the Residence Time Distribution** in Screw Extruders-, *Polym. Eng. Sci.*, 39, p. 930-939, (1999)

Iwasaki T. & Skelton R.E., -The XY-Centring algorithm for dual LMI problems: A New approach to fixed-order control design -, *Int. J. Control*, 62, p. 1257-1272, (1995)

Iwasaki T. & Skelton R.E., -All Controllers for the general H_{∞} Control Problem: LMI Existence Conditions and State-Space Formulas-, *Automatica*, 30, n° 8, p. 1307-1317, (1994)

Janssen L.P.B.M, **-Twin screw extrusion**-, Elsevier, Amsterdam, (1978)

Kadri I., -Etude de la distribution des temps de séjour dans une extrudeuse bivis corotative et modélisation de la chimie aux interfaces-, Thèse de Doctorat, Université « Louis Pasteur » de Strasbourg (1997)

Karmarkar N. A., **-A new polynomial time algorithm for linear programming** *Combinatorica*, 4, n° 4, p. 373-395, (1984)

Kim B. & White J. L., -Simulation of thermal degradation, peroxide induced degradation, and maleation of polypropylene in a modular co-rotating twin screw extruder-, *Polym. Eng. Sci.*, 37, p. 576-589, (1997)

Kim P.J. & White J.L., **-Transesterification of Ethylene Vinyl Acetate Copolymer in a Modular Intermeshing Corotating Twin Screw Extruder with Different Screw Configuration -**, *J. Appl. Polym. Sci.*, 54, p. 33-45, (1994)

Kricheldorf H. R., Sumbél M. & Kreiser-Saunders I., -Polylactone 20. Polymerization of ε -Caprolactone with Tributyltin derivatives: A mechanistic study-, *Macromolecules*, 24, p. 1944-1949, (1991)

Kulshreshtha M. K. & Zaror C. A., -An unsteady state model for twin screw extruders-, *Trans. IchemE.*, 70, p. 21-28, (1992)

Kulshreshtha M. K., Zaror C. A. & Jukes D. J., **-Simulating the performance of a control** system for food extruders using model-based set-point adjustment-, *Food Control*, 6, n° 3, p. 135-141, (1995)

Kulshreshtha M. K., Zaror C. A., Jukes D. J. & Pyle D. L., -A generalized steady state model for twin screw extruders-, *Trans. IchemE.*, 69, p. 189-199, (1991)

Kye H. & White J. L., -Simulation of continuous polymerisation in a modular intermeshing co-rotating twin-screw extruder-, *Inter. Polym. Proc.*, 11, p. 129-138, (1996)

Li C-H., -**Modelling extrusion cooking**-, *Mathematical and Computer Modelling*, 33, p. 553-563, (2001)

Lu Q., Mulvaney S. J., Hsieh F. & Huff H. E., - Model and strategies for computer control of a twin-screw extruder-, *Food Control*, 4, n° 1, p. 25-33, (1993)

Magni J.F., -Modal Control Toolbox User's Guide-, CERT-ONERA, BP 4025, 31055 Toulouse Cedex, France, 1997.

Magni J.F. & Champetier C., - Commande modale des systèmes multivariables-, *Polycopié*. SUPAERO, (1990)

Martelli F.G., **-Twin screw extrusions: a basic understanding-**, *Van Nostrand, Reinhold*, New York, (1982)

Michaeli W. & Grefenstein A., -An analytical model of the conveying behaviour of closely intermeshing co-rotating twin screw extruders-, *Inter. Polym. Proc.*, 11, p. 121-128, (1996)

Michaeli W., Grefenstein A. & Berghaus U., **-Twin-screw extruders for reactive extrusion**, *Polym. Eng. Sci.*, 35, p. 1485-1504, (1995)

Moreira R., Srivastava A. & Gerrish J., **-Feedforward control model for twin screw food extruder**-, *Food Control*, 1, n° 3, p.179-184, (1990)

Nesterov Y. & Nemirovski A. -A general approach to polynomial-time algorithm design for convex programming-, *Technical report, Centr. Econ. Math Inst. USSR Acad Sci Moscow*, (1988)

Nesterov Y. & Nemirovski A., -Interior point polynomial methods in convex programming: theory and applications-, volume 13 of *SIAM Studies in Applied Mathematics.*, Philadelphia, (1994)

Nietsch T., Cassagnau P. & Michel A., -Melt temperature and residence times in an extruder by infrared spectroscopy -, *Inter. Polym. Proc.*, 12, n° 4, p. 307-315, (1997)

Nikoukha R., Delebeque F. & ElGhaoui L. -LMI Tool: A package for LMI optimisation in scilab-. INRIA, Rocquencourt, 1995.

Noé I., **-Etude des écoulements de polymères dans une extrudeuse bivis corotative-**, Thèse de doctorat, Ecole des mines de Paris, (1992)

Oberlerhner J., Cassagnau Ph. & Michel A., -Local Residence Time Distribution in a Twin Screw Extrusion-, *Chem. Eng. Sci.*, 49, p. 3897-3907, (1994)

Peres P., Geromel J.C., Bernussou J. & Siguerdidjane. H., -Acutting plane technique applied to robust control synthesis-, In UK Pergamon, Oxford, editor, proceedings of the 8th IFAC workshop, pp. 105-109, Paris, France, June (1989)

Potent H., Lappe H. & Fornefeld A., -Verweilzeit bei Einschnecken-extrudern : wie sich messtechnische aufwand in grenzen hält-, *Plasteverarbeiter*, 35, p. 31-33, (1984)

Potente H., Ansahl J.& Wittemeier R., -Throughput characteristics of tightly intermeshing co-rotating twin-screw extruders-, *Inter. Polym. Proc.*, 5, p. 208, (1990)

Poulesquen A. & Vergnes B., -A study of residence time distribution in co-rotating twin screw extruders: Part I: Theoretical modelling-, *Polym. Eng. Sci.*, 43, n° 12, p. 1841-1848, (2004b)

Poulesquen A., -Contribution à la modélisation de l'extrusion réactive en machine bi-vis-, Thèse de doctorat, Ecole des mines de Paris, (2001)

Poulesquen A., Vergnes B., Cassagnau Ph, Michel A. & Carneiro O. S., -A study of residence time distribution in co-rotating twin screw extruders: Part II : Experimental validation-, *Polym. Eng. Sci.*, 43, n° 12, p. 1849-1862, (2004b)

Prat L., Guiraud P., Gourdon C., & N'Diaye S., **-Transport d'un milieu complexe polyphasique matériau végétal/solvant en extruder bi-vis-**, 6^{ème} CFGP, *Récents progrès en Génie des Procédés*, 11, p. 53, 24-26, Septembre, Paris, (1997)

Prat L., Guiraud P., Rigal L. & Gourdon C., -Solid-liquid reactive extraction with raw plant substance-, in: *Proceedings of the Second European Congress of Chemical Engineering*—*ECCE 2,* Montpellier, France, 5-7 October, (1999)

Prat L., N'Diaye S., Rigal L. & Gourdon C., -Solid-liquid transport in a modified corotating twin-screw extruder—dynamique simulator and experimental validation-, *Chem. Eng. Proc.* 43, n° 7, p. 881-886, (2004)

Puaux, J.P. & Ainser A., -Residence time distribution of a twin-screw extruder-, *ANTEC'94*, p. 1500-1503, (1994)

Puaux, J.P., Bozga, G., & Ainser, A., -Residence time distribution in a corotationg twinscrew extruder-, *Chem. Eng. Sci.*, 55, p. 1641-1651, (2000).

Safonov M. G., Limebeer D.J.N. & Chiang R.Y., -Simplifying the H_{∞} theory via loopshifting, Matrix-Pencil and Descriptor Concepts-, *Int. J. Control*, 50 n°6, p. 2467-2488, (1989) Scorletti G. & Fromion V., -Introduction à la commande multivariable des systèmes: méthode de synthèse H_{∞} , Polycopié Université/ENSI Caen, (2001)

Scorletti G., -Introduction à l'optimisation LMI pour l'automatique- Polycopié Université de Caen, (2004)

Singh B. & Mulvaney S. J., -Modeling and process control of twin-screw cooking food extruders-, *J. of Food Eng.*, 23, p. 403-428, (1994)

Szydlowsky W. & White J.L., -A non newtonian model of flow in a kneading disc region of a modular intermeshing corotating twin-screw extruder-, *J. Non Newt. Fluid mech.*, 28, p. 29-46, (1988a)

Szydlowsky W. & White J.L., -An improved theory of metering in an intermeshing corotating twin-screw extruder-, *Adv. Polym. Tech.*, 7, p. 177-183, (1987)

Szydlowsky W. & White J.L., -Improved model of flow in the kneading disc region of an intermeshing co-rotating twin screw extruder-, *Inter. Polym Proc.*, 2, p.142-150, (1988b)

Szydlowsky W., Brzoskowski R., & White J.L, -Modelling flow in an intermeshing corotating twin-screw extruder: flow in kneading discs-, *Inter. Polym. Proc.*, 1, p. 207-214, (1987)

Tan J. & Hoffer J. M., -Self-tuning predictive control of processing temperature for food extrusion-, *J. Proc. Cont.*, 5, n° 3, p. 183-189, (1995)

Tayeb J., Della Valle G., Barrès C. & Vergnes B., -Simulation of transport phenomena in twin screw extruders-, in: *"Food extrusion, Science and Technology"*, Kokini J. L., Ho C-T., Karve Eds M. V., Dekker M., New York, (1992)

Tayeb J., Vergnes B. & Della Valle G., -A basic model for a twin screw extruder-, J. of Food Sci., 54, p. 1047-1056, (1989)

Tayeb J., Vergnes B. & Della Valle G., **-Theoretical Computation of the isothermal flow through the reverse screw element of a twin screw extrusion cooker-**, *J. of Food Sci.*, 53, p. 616-625, (1988)

Todd D. B., -Residence time distribution in twin-screw extruders-, *Polym. Eng. Sci.*, 15, p. 437-443, (1975)

Tood D., -Heat transfert in twin-screw extruders-, *Society of Plastics Engineers ANTEC*, p. 54-58, (1988)

Tsai C.-C. & Lu C.-H., -Multivariable self-tuning temperature control for plastic injection molding process-, *IEEE Transactions on Industry Applications*, 34, n° 2, p. 310-318, (1998)

Vergnes B. & Agassant J.F., - Modélisation des écoulements dans les filières d'extrusion -, *Techniques de l'Ingénieur, traités Plastiques et Composites*, A 3 655, p. 1-21, (1993)

Vergnes B. & Chapet M., -Procédés d'extrusion bivis-, *Techniques de l'Ingénieur, traités Plastiques et Composites*, AM 3 653, p. 1-26, (2000)

Vergnes B. et Noé I., colloque GFP, Lyon, 1992

Vergnes B., Delacour M. L., Souveton G. & Bouvier J. M., PPS-15 Annual meeting, S'Hertogenbosh, (1999)

Vergnes B., Della Valle G. & Delamare L., -A global computer software for polymer flows in corotating twin screw extruders-, *Polym. Eng. Sci.*, 38, p. 1781-1792, (1998)

Vergnes B., Souveton G. & Delacour M. L., -Experimental and theoretical study of polymer melting in a corotating twin screw extruder-, *Inter. Polym. Proc*, (2001)

Villermaux J., -Génie de la réaction chimique, conception et fonctionnement des réacteurs-, *Technique et Documentation Lavoisier*, Paris, (1995)

Wang Y. & Tan J., **-Dual-target predictive control and application in food extrusion**-, *Control Eng. Practice*, 8, p. 1055-1062, (2000)

Wang Y. & White J.L., -Non-Newtonian flow modelling in the screw regions of an intermeshing corotating twin-screw extruder-, J. Non Newt. Fluid mech., 32, p.19-38, (1989)

Wang Y., White J.L. & Szydlowsky W., -Flow in modular intermeshing co-rotating twin-

screw extruder-, Inter. Polym Proc., 4, p. 262-269, (1989)

Werner H., -Das Betriebsverhalten des zweiwelligen knetscheiben schnecken press von type ZSK bei der verarbeitung von hochvisckosen flüssigkeiten-, Dr. Ing. Dissertation, Université de Munich, (1976).

Yacu W. A., -Modelling a twin screw co-rotating extruder-, J. of Food Eng., 8, p. 1-21, (1985)

Zhou K., Doyle J.C. & Glover K. -Robust and Optimal Control-, Prentice-Hall, (1996)

NOMENCLATURE
Nomenclature

Lettres romaines :

A, B, C, D	Matrices définissant le système $\dot{x} = Ax + Bu$ et $y = Cx + Du$
[I ₀]	Concentration en initiateur
$[M_0]$	Concentration en monomère
$[M_0]/[I_0]$	Rapport des concentrations en monomères et en initiateurs
A_f	Section transversale libre d'un disque malaxeur
В	Pas de vis
C_e	Circonférence du circuit bivis
C_l	Entraxe des vis
C_p	Capacité calorifique, (chaleur spécifique de la matière ?)
D_e	Diamètre équivalent du circuit bivis
D_{ext}	Diamètre externe des vis
Ε	Epaisseur d'un élément malaxeur
е	Epaisseur du filet dans un plan perpendiculaire au chenal des vis
E(t)	Fonction densité
E_a	Energie d'activation
E_b	Energie d'activation du polymère brut
E_m	Energie d'activation du monomère
E_s	Energie d'activation de la solution de polymère
f	Taux de remplissage
F_{0}	Débit massique d'alimentation
Н	Profondeur du chenal
K _{app}	Constante de vitesse
L	Longueur du morceau de vis
l_0	Longueur du raccordement entre deux disques successifs d'un bloc malaxeur
L_{ch}	Longueur du chenal
l_k	Longueur totale d'un bloc malaxeur
m^{ε}	Masse molaire du monomère
m^{I}	Masse molaire de l'amorceur
M_{tot}	Masse totale de la matière dans le réacteur

M_w	Masse molaire moyenne en masse
ΔM	Marge de module
Ν	Vitesse de rotation des vis
n	Nombre de filet d'une vis
n _c	Nombre de RCPA de la cascade
<i>n</i> _d	Nombre de disques dans un bloc malaxeur
Р	Pression
Q_0	Débit volumique de la matière
Q_c	Débit volumique de cisaillement
Q_{ch}	Débit volumique dans le chenal de la vis
Q_p	Débit volumique de contre-pression
R	Constante des gaz parfaits
r	Vitesse de réaction
R _{ext}	Rayon externe des vis
R _{in}	Rayon interne des vis
Sf	Section transversale du fourreau
S_F	Section transversale libre du fourreau
S _V	Section transversale des vis
S_{v}	Section transversale d'une vis
S_u	Fonction de sensibilité
T_{ext}	Température de l'air ambiant
T^{f}	Température fourreau
T _{in}	Température du produit à l'entrée de l'extrudeuse
T^m	Température matière
T^{ν}	Température vis
T_u	Fonction de sensibilité complémentaire
U_{ext}	Coefficient d'échange entre le fourreau et l'air extérieur
U_{f}	Coefficient d'échange entre la matière et le fourreau
U_{v}	Coefficient d'échange entre la matière et les vis
V	Volume libre dans le réacteur
V _c	Volume d'une chambre en C
V_p	Volume du chenal des vis
V_z	Vitesse axiale

- *W* Largueur du chenal d'une vis
- \overline{w} Longueur du méplat d'un disque malaxeur
- X_{RF} Avancement de la réaction de un réacteur fermé
- Z_i , Puissances générées par dissipation visqueuses d'après Yacu (1985)

Lettres grecques :

γ̈́	Taux de cisaillement
δ	Jeu entre le sommet de filet et la surface interne du fourreau
ε	Jeu entre le sommet de filet d'une vis et le fond du chenal de l'autre
ϕ	Angle d'hélice de la vis
ϕ	Puissance de chauffe des fourreaux
Ψ	Angle d'interpénétration
α	Angle définissant l'épaisseur du filet
τ	Temps de séjour moyen
σ	Jeu entre les flancs de filets des deux vis
$lpha_d$	Angle de décalage entre les malaxeurs
λ_f	Conductivité thermique du fourreau
η_{fil}	Viscosité de la matière en filière
η	La viscosité de la matière
η_0	Viscosité au plateau newtonien
$ ho_m$	Densité de la matière
λ_v	Conductivité thermique des vis
Δ	Incertitudes
σ	Valeur singulière

ANNEXES

Annexes

Annexe 1

a) La Distribution des temps de séjour (DTS):

Le concept de la distribution des temps de séjour (DTS) a été introduit pour la première fois par Dankwerts en 1953. Cette approche, complémentaire à celle de la dynamique des fluides, permet d'aboutir à une description des phénomènes d'écoulement et de mélange en régime stationnaire dans les réacteurs chimiques homogènes isothermes. L'auteur a ainsi défini des fonctions de distribution aisément accessibles à l'expérience. Ce concept de DTS a suscité de nombreuses recherches et il a été considéré comme étant une notion clé dans le domaine génie des procédés. Les distributions de temps de séjour sont essentiellement mises en œuvre en régime permanent.

L'étude de la DTS permet une meilleure compréhension des écoulements, la mise en évidence d'anomalie, la prévision du rendement d'un réacteur et l'extrapolation à des systèmes de tailles supérieures. L'idée de la DTS est de décrire l'histoire d'un réactif dans un réacteur. En conséquence, elle caractérise la dynamique d'écoulement du procédé.

Villermaux a défini la notion de DTS comme suit (Villermaux, 1995) (Figure A1-1):





« Les molécules qui rentrent dans un réacteur fonctionnant en continu n'y séjournent pas pendant la même durée étant donné qu'elles ne parcourent pas forcément le même chemin. La DTS est une caractéristique de ce comportement ».

Dans un réacteur réel, les molécules séjournent dans le volume réactionnel pendant des temps t_s qui dépendent notamment du profil hydrodynamique et de la géométrie du réacteur. En effet, considérons par exemple deux particules toutes deux placées dans le même plan à l'entrée de l'extrudeuse : la première se situe en haut de filet arrière de la vis, la

seconde au centre de la vis. Les trajectoires de ces deux particules vont alors être différentes le long de l'extrudeuse. Le chemin parcouru par la première va plutôt décrire une trajectoire hélicoïdale alors que celui de la seconde sera beaucoup plus rectiligne. En sortie de filière, ces deux particules n'auront donc pas eu le même temps de résidence dans l'extrudeuse. Ces temps peuvent s'écarter notablement du temps de séjour moyen \bar{t}_s . En généralisant à *n* particules, on obtient une distribution des temps de séjour exprimée de manière qualitative à l'aide d'une fonction densité noté E(t).

Ainsi, la connaissance de la distribution de temps de séjour (DTS) conduit à des informations globalisées et synthétiques qui révèlent parfois des comportements invisibles dans une masse trop grande d'informations locales.

b) Détermination expérimentale de la DTS d'un écoulement en régime permanent à l'aide d'un traceur

La détermination de la distribution des temps de séjour expérimentalement est classiquement réalisée au moyen d'un traceur. Ce dernier est considéré comme pouvant « *marquer* » les molécules entrant dans le réacteur : il suffit de dénombrer les molécules ainsi marquées dans le courant de sortie en fonction du temps (mesure de la concentration). On peut injecter un traceur radioactif, un colorant, un sel, ou toute substance de mêmes propriétés hydrodynamiques que le fluide. Le point le plus important est que le traceur doit être décelable par une propriété physique caractéristique telle que la conductivité électrique, thermique ou la fluorescence (Bur et Gallant, 1991 ; Nietsch et al., 1997, Hu et al., 1999). Il doit aussi être strictement inerte, c'est à dire subir le même écoulement que le fluide tracé (Cassagnau et al., 1991).

Pour mesurer E(t), on peut injecter le traceur de différentes manières : impulsion, échelon, injection continue (sinusoïdale par exemple). Analysons le cas d'une injection de type impulsionnelle.

Si l'on incorpore ponctuellement une certaine quantité m de traceur au niveau de la zone d'alimentation à l'instant t=0, la fraction de matière de concentration c(t), sortant de l'extrudeuse à l'instant t a nécessairement eu un temps de séjour égal à t car toutes les

particules de traceur ont été injectées au même moment. E(t) étant une distribution de probabilité, on peut montrer que :

$$E(t) = Q \frac{c(t)}{m}$$
 Eq. A1-1

Avec *Q* le débit volumique. La relation Eq. A1-1 permet de satisfaire la condition de normalisation $\int E(t)dt = 1$

La mesure de la de la concentration c(t) en fonction du temps permet de calculer la fonction E(t). L'expression Eq. A1-1 peut aussi être exprimée en fonction du signal c(t) uniquement :

$$E(t) = \frac{c(t)}{\int_{0}^{\infty} c(t)dt}$$
 Eq. A1-2

puisque $m = Q \int_{0}^{+\infty} c(t) dt$

D'un point de vue automatique E(t) n'est autre que la réponse impulsionnelle de l'écoulement vis-à-vis d'un traceur. La Figure A1-2 compare l'allure de la DTS d'un réacteur piston et d'un RCPA avec un réacteur quelconque.



Figure A1-2 : DTS de certains réacteurs (Villermaux, 1995)

Le choix de la technique de mesure et du traceur est basé sur les critères suivants (Cassagnau et al., 1991) :

- > Le traceur ne doit pas modifier ou perturber l'écoulement,
- > Il ne doit pas influencer la réaction dans le cas de mélanges réactifs,
- > Sa réponse doit être la plus élevée possible pour minimiser sa concentration.

Dans la littérature, de nombreuses méthodes ont été décrites pour déterminer la DTS dans une extrudeuse. Elles peuvent être classées selon différents critères (Poulesquen, 2001) :

- Mesure de la DTS a posteriori (mesure off-line) : elle consiste à prélever des échantillons durant le procédé, puis marqués les temps de prélèvement par rapport au temps d'injection du traceur. Les concentrations de traceur contenues dans tous les échantillons prélevés sont ensuite déterminées séparément et tracées en fonction de leur temps de prélèvement. L'inconvénient majeur de cette technique de mesure reste le fait que l'analyse des échantillons est très fastidieuse et parfois très longue. De plus, du fait que la mesure est discrète cela augmente considérablement les incertitudes de mesure. Parmi les techniques de mesure off-line, on peut citer, la densimétrie (Potente & al., 1984), Fluorescence UV (Cassagnau et al., 1991), ...
- Mesure de la DTS en ligne (mesure on-line) : elle consiste en l'installation d'une ou plusieurs sondes disposées où l'on désire le long du fourreau, que ce soit en sortie de filière pour obtenir la DTS globale du procédé, ou à différents endroits de la vis pour avoir accès à des DTS dites « *locales* ». La concentration du traceur est mesurée directement lorsque le traceur passe sous la sonde et est converti en intensité ou tension. Cette technique de mesure est beaucoup plus précise et rapide que la mesure off-line. Toutefois, elle nécessite un équipement plus complexe et plus coûteux (spectroscopie fluorescente par exemple) (Hu et al., 1999; Nietsch et al., 1997).

Annexe 2

Démonstration que A est inversible

D'une manière générale, la matrice A a la forme suivante :



où les dernières lignes des blocs représentent un élément restrictif. Les sous-matrices A_{ii} sont des matrices carrées.

Compte tenu de la forme de A:

$$A = \frac{A_{11}}{0} \frac{A_{12}}{A_{22}}$$

Dans ce cas, le déterminant de la matrice A est donné par : $det A = det A_{11} \cdot det A_{22}$

Ainsi, d'une manière générale le déterminant de A peut être calculé comme suit :

$$det A = \prod det A_{ii}$$
 Eq. A2-1

Si on prend l'exemple où le profil de vis est composé de deux éléments de pas direct suivi d'un pas inverse et de quatre éléments à pas direct. Le vecteur du taux de remplissage à un instant donné est $f^{T} = (f_1 \ 1 \ 1 \ f_4 \ 1 \ 1 \ 1)$. Dans ce cas de figure la matrice A aura l'allure suivante :

	1	0	0	0	0	0	0
	$-R_2^r$	$R_2^r + R^p$	$-R^{p}$	0	0	0	0
	0	$-R^{p}$	$R_3^r + R^p + R_4^r$	$-R_{3}^{r}-R_{4}^{r}$	0	0	0
A=	0	0	0	1	0	0	0
	0	0	0	$-R_5^r$	$R_5^r + R_6^r$	$-R_6^r$	0
	0	0	0	0	$-R_6^r$	$R_{6}^{r}+R_{7}^{r}$	$-R_{7}^{r}$
	0	0	0	0	0	$-R_{7}^{r}$	$R_7' + R_f'$

Ainsi, on voit bien que le déterminant de la matrice A est égal à :

 $det A = det A_{11} \cdot det A_{22}$

Nous allons maintenant démontrer par récurrence que le déterminant de A est strictement positif (sachant que les coefficients R_i^r de la matrice A sont strictement positifs).

La matrice A s'écrit d'une manière générale comme suit :

Le calcul du déterminant est alors donné par :

 $D_1 = R_1^r + R_1^r > 0 \implies \text{Vrai car } R_1^r \text{ et } R_2^r \text{ sont strictement positifs.}$

$$D_{2} = \begin{bmatrix} R_{1}^{r} + R_{2}^{r} & -R_{2}^{r} \\ \\ -R_{2}^{r} & R_{2}^{r} + R_{3}^{r} \end{bmatrix} \implies det(D_{2}) = R_{3}^{r} \cdot (R_{1}^{r} + R_{2}^{r}) + R_{1}^{r} \cdot R_{2}^{r}$$

 $\Rightarrow det(D_2) = R_3^r \cdot det(D_1) + R_1^r \cdot R_2^r > 0$

$$D_{3} = \begin{bmatrix} R_{1}^{r} + R_{2}^{r} & -R_{2}^{r} & 0 \\ -R_{2}^{r} & R_{2}^{r} + R_{3}^{r} & -R_{3}^{r} \\ 0 & -R_{3}^{r} & R_{3}^{r} + R_{4}^{r} \end{bmatrix} \Rightarrow det(D_{3}) = R_{4}^{r} \cdot det(D_{2}) + R_{1}^{r} \cdot R_{2}^{r} \cdot R_{3}^{r} > 0$$

$$D_4 = \begin{bmatrix} R_1^r + R_2^r & -R_2^r & 0 & 0 \\ -R_2^r & R_2^r + R_3^r & -R_3^r & 0 \\ 0 & -R_3^r & R_3^r + R_4^r & -R_4^r \\ 0 & 0 & -R_4^r & R_4^r + R_5^r \end{bmatrix}$$

 $\Rightarrow det(D_4) = R_5^r \cdot det(D_3) + R_1^r \cdot R_2^r \cdot R_3^r \cdot R_4^r > 0$

On suppose $det(D_i) > 0$, avec

$$\Rightarrow det(D_{i}) = R_{i+1}^{r} \cdot det(D_{i-1}) + \prod_{j=1}^{r} R_{j}^{r} > 0 \qquad \text{Eq. A2-2}$$

$$\text{La matrice } D_{i+1} = \begin{bmatrix} D_{i-1} & v^{T} & O^{T} \\ v & R_{i}^{r} + R_{i+1}^{r} & -R_{i+1}^{r} \\ 0 & -R_{i+1}^{r} & R_{i+1}^{r} + R_{i+2}^{r} \end{bmatrix}$$

avec $v = \left[0 \cdots 0 - R_i^r\right], O = \left[0 \cdots 0\right]$

Si on écrit le déterminant de D_{i+1} par rapport à la dernière ligne, on obtient :

$$det(D_{i+1}) = \left(\left(R_{i+1}^r + R_{i+2}^r \right) det(D_i) \right) - \left(-R_{i+1}^r \left(-R_{i+1}^r \right) det(D_{i-1}) \right)$$

$$det(D_{i+1}) = R_{i+2}^r \cdot det(D_i) + R_{i+1}^r \cdot det(D_i) - \left(R_{i+1}^r \right)^2 \cdot det(D_{i-1})$$

Compte tenu de l'équation Eq. A2-2, on obtient :

$$det(D_{i-1}) = det(D_i)/R_{i+1}^r - \left(\prod_{j=1}^i R_i^r\right)/R_{i+1}^r$$
$$det(D_{i+1}) = R_{i+2}^r \cdot det(D_i) + R_{i+1}^r \cdot det(D_i) - \left(R_{i+1}^r\right)^2 \cdot \left(det(D_i)/R_{i+1}^r - \left(\prod_{j=1}^i R_i^r\right)/R_{i+1}^r\right)$$

$$\Rightarrow det(D_{i+1}) = R_{i+2}^r \cdot det(D_i) + \prod_{j=1}^{i+1} R_j^r > 0$$
 Eq. A2-3

On en déduit donc aussi que $det(D_{i+1})>0$;

A travers cette récurrence, nous venons de démonter que le déterminant de la matrice *A* est strictement positif. De ce fait la, matrice *A* est inversible.

Annexe 3

Notions d'optimisation

Un problème d'optimisation peut s'écrire sous la forme :

$$\min_{\xi \in C} f(\xi) \qquad \qquad \text{Eq. A3-1}$$

où C est l'ensemble des contraintes, ξ est la variable d'optimisation (ξ est de dimension finie quand $C \subset \Re^m$), la fonction f (avec $f(\xi) \in \Re$) est l'objectif ou la fonction coût.

L'ensemble *C* des contraintes peut être défini par un ensemble d'inégalités et d'égalités. Si leur nombre est fini et si ξ est de dimension finie alors on parle de problèmes d'optimisation de dimension finie. Un problème d'optimisation particulier (mais important) est le *problème de faisabilité* : trouver ξ , s'il existe, tel que $\xi \in C$. En automatique, cela peut correspondre à rechercher un correcteur qui satisfasse les spécifications d'un cahier des charges.

Dans le cas général, la résolution par un algorithme est un problème « *compliqué* » (Figure A3-1a). En effet, à partir d'un point initial ξ_0 , les algorithmes efficaces disponibles recherchent un minimum local. Si la fonction *f* admet plusieurs minima, le résultat va dépendre du point initial ξ_0 . Un cas très intéressant est celui où il n'existe qu'un seul minimum local (minimum local = minimum global), le problème est de faible complexité (Figure A3-1b).



Figure A3-1 : Exemple d'une fonction sur \Re : a) à plusieurs minima ; b) à un seul minimum (Scorletti, 2004)

Indépendamment du point initial, le minimum global sera alors atteint. Cette propriété est obtenue dans le cas où f est une fonction convexe et où C est convexe (voir définitions annexe 3) : on parle alors d'*optimisation convexe*. La convexité d'un problème d'optimisation à un double avantage :

- Les temps de calcul pour trouver une solution sont raisonnables ;
- Il n'existe pas de minimum local de la fonction coût à optimiser : le résultat obtenu correspond à un minimum global unique.

La convexité est une notion à la fois ensembliste et fonctionnelle, voici les définitions dans chacun des cas.





Figure A3-2 : Ensemble non convexe (gauche), convexe (droite) (Scorletti , 2004)

Soit un ensemble $C \subset \Re^m$, *C* est un ensemble convexe si et seulement si

$$\forall \lambda \in [0, 1] \subset \mathfrak{R}, \forall (x_1, x_2) \in C^2, \ \lambda x_1 + (1 - \lambda) x_2 \in C$$
 Eq. A3-2

Définition A3-2 : *Fonction convexe*

Soit une fonction $f: C \subset \Re^m \to \Re$ avec C un ensemble convexe, alors f est convexe si et seulement si

$$\forall \lambda \in [0, 1] \subset \mathfrak{R}, \forall (x_1, x_2) \in C^2, f(\lambda x_1 + (1 - \lambda) x_2) \leq \lambda f(x_1) + (1 - \lambda) f(x_2)$$
 Eq. A3-3

convexité stricte : \leq *remplacé par* <

Un certain nombre de classe de problèmes d'optimisation convexe de dimension finie admettent des algorithmes de résolution efficaces. Parmi ceux-ci, se trouve l'optimisation *LMI*.

Problèmes d'optimisation sous contrainte LMI

Depuis quelques années, de nombreux travaux ayant pour principal but de réduire une grande variété de problème de synthèse ou d'analyse à des problèmes d'optimisation convexe impliquant des *LMI* ont vu le jour. Parallèlement, des méthodes de point-intérieur développées initialement par Karmakar (1984) pour la programmation linéaire furent étendues ensuite par Nesterov et Nemirovski (1988, 1994) au cas de la programmation convexe dans l'espace des matrices définies positives.

Parmi les raisons qui ont fait de cette approche une des plus appliquées dans le domaine de la commande, on peut citer : l'existence de méthodes de résolution numérique efficaces ou la possibilité de traiter la commande multicritères. Dans cette partie, on présente les idées de base de l'approche *LMI* (Boyd et al., 1994).

Définition A3-3: étant donnée une famille de matrices symétriques $\{F_i\}_{i=0...m} de \Re^{n \times n}$ et un vecteur ξ , $\xi = (\xi_1, \xi_2, ..., \xi_m)^T \in \Re^m$, une inégalité matricielle linéaire (LMI) stricte (resp. non stricte) s'écrit sous la forme :

$$F(\xi) = F_0 + \sum_{i=1}^{m} \xi_i F_i > 0 \quad (resp. \ge 0)$$
 Eq. A3-4

Les trois problèmes d'optimisation convexe les plus rencontrés sous la forme *LMI* sont les suivants :

• Problème de faisabilité : il s'agit de trouver un vecteur ξ tel que la contrainte convexe $F(\xi) > 0$ est satisfaite. Ce problème peut être résolu en cherchant le vecteur ξ minimisant le scalaire *t* tel que :

$$-F(\xi) < t \cdot I$$
 Eq. A3-5

Si la valeur de t minimale est négative, le problème est faisable.

• **Problème de minimisation d'une fonction coût linéaire :** il s'agit de minimiser un objectif linéaire sous contrainte de type *LMI*, supposé faisable :

minimiser
$$c^T \xi$$

pour $\xi \in \Re^m$ Eq. A3-6
contraint par $F(\xi) > 0$

où c^{T} est un vecteur ligne donné de même dimension que ξ .

• Problème de valeurs propres généralisées : il s'agit de minimiser la plus grande valeur propre généralisée d'une paire de matrices, par rapport à une contrainte *LMI*. Ce type de problème est numériquement coûteux. Il se formalise ainsi :

minimiser
$$\lambda$$

pour $\lambda \in \Re, \xi \in \Re^m$
contraint par
$$\begin{cases} \lambda F(\xi) - G(\xi) > 0 \\ F(\xi) > 0 \text{ et } H(\xi) \end{cases}$$
Eq. A3-7

Commentaire A3-1 : *LMI non strictes*. Les contraintes relatives à chacun des trois problèmes sont strictes. Il peut arriver que l'on ait à prendre en compte des inégalités non strictes. La *LMI non stricte* $F(\xi) \ge 0$ est strictement faisable si $F(\xi) > 0$ est faisable. Quand une *LMI* est faisable mais ne peut l'être strictement, la solution du problème sous sa version stricte peut être différente de sa version non stricte. Pour illustrer cette situation, considérons l'exemple suivant :

$$F(\xi) = \begin{pmatrix} \xi & 0 \\ 0 & -\xi \end{pmatrix}, \quad \xi \in \Re$$
 Eq. A3-8

La contrainte stricte $F(\xi) > 0$ est non faisable alors que $F(\xi) \ge 0$ a pour solution unique $\xi = 0$.

Une méthode basée sur la réduction aux *LMI* strictes est proposée en (Boyd et al., 1994). La méthode est basée sur l'élimination de l'égalité implicite du problème non strict.

Ces problèmes d'optimisation convexe peuvent alors être résolus par différents types de méthodes. Nous exposons ici très rapidement deux grandes familles de méthodes permettant de traiter ce type de problème.

• Méthodes des plans sécants : ces méthodes ont été introduites dans le cadre de la programmation convexe au cours des années 70 (Elzinga & Moore, 1975) et ont été mises en application dans le domaine de la commande robuste dans les années 80 (Geromel et al., 1991 ; Peres et al., 1989).

Les méthodes des plans sécants assurent la convergence vers l'optimum en temps polynomial. En revanche l'implantation sur calculateur conduit souvent à des temps de calcul prohibitifs.

Le principe consiste à construire un ellipsoïde contenant la solution et à rechercher la plus petite ellipsoïde contenant l'intersection de l'ellipsoïde initiale et d'un plan passant par son centre. On procède de la même manière itérativement. La décroissance des ellipsoïdes est géométrique et la convergence a lien en temps polynomial.

• Méthodes du point intérieur : ces méthodes sont basées sur la notion de fonction barrière définie par :

$$\Phi(\xi) = \begin{cases} -\log(\det(F(\xi))) & \text{si } F(\xi) > 0 \\ \infty & \text{sinon} \end{cases}$$
 Eq. A3-9

Ainsi le problème de faisabilité précédemment défini revient à minimiser la fonction $\Phi(\xi)$. Pour cela, il fait appel aux outils d'optimisation non différentiable d'une part et à la notion de fonctions auto-concordantes (Nesterov et Nemirovski, 1994).

Plusieurs outils sont disponibles pour la résolution de *LMI*. Citons les deux les plus connus d'entre eux :

✓ LMI Control Toolbox. Cette boite à outils Matlab est proposée par P. Gahinet et A. Nemirovski (Gahinet et al., 1995).

LMITOOL. Développé par R. Nikoukha et al. (1995). Dans ce logiciel plusieurs solveurs LMI associés au logiciel SP développé par Boyd et al. sont disponibles.

Les inégalités matricielles bilinéaires

Un nombre important de problème de commande et d'observation s'expriment sous forme d'inégalités matricielles bilinéaires (*BMI* suivant l'acronyme anglo-saxon) qui peuvent être vues comme une généralisation des *LMI*. Une BMI peut être définie comme suit :

Définition A3-4 : On appelle BMI en ξ_i , $i \in I_m$, une contrainte de la forme :

$$B(\xi) = B_0 + \sum_{i=1}^m \xi_i B_i + \sum_{k=1}^m \sum_{l=1}^m \xi_k \xi_l B_{kl} > 0 \quad (resp. \ge 0)$$
 Eq. A3-10

où les matrices B_i et B_{kl} appartenant à $\Re^{n \times n}$ sont symétriques.

Les *BMI*, qui ne sont pas convexes, peuvent avoir plusieurs solutions locales et ne peuvent pas être résolues par les techniques d'optimisation convexe développées pour la résolution des *LMI*. De telles contraintes apparaissent dans de nombreux problèmes ; des méthodes itératives permettent, sans garantir la convergence, de résoudre certaines classes de *BMI*. Ces dernières années des algorithmes aboutissant à des solutions locales (Hassibi et al., 1999) et globales (Beran et al., 1997) ont été proposées pour résoudre ces problèmes non convexes.

Cependant, certains problèmes *BMI* peuvent se ramener facilement à des *LMI*. Plusieurs méthodes sont alors envisageables (Scorletti, 2004):

- 1. Par un changement de variable.
- 2. Par les techniques d'élimination de variables.
- 3. Par changement de base.

Annexe 04 :

Incertitudes non structurées

Туре	Système incertain	Incertitude modélisée	М
Additif direct	$u \rightarrow G_{mod} \rightarrow \psi \rightarrow \psi \rightarrow \psi$	Incertitudes paramétriques Modes souples	KSy=SuK
Multiplicatif direct en entrée	$u \xrightarrow{+} G_{mod} \xrightarrow{y}$	Marges d'entrée Actionneurs incertains	Tu
Multiplicatif direct en sortie	$\overset{u}{\longrightarrow} G_{mod} \overset{+}{\longrightarrow} \overset{y}{\longrightarrow} \overset{+}{\longrightarrow} \overset{y}{\longrightarrow} \overset{+}{\longrightarrow} \overset{+}{\longrightarrow} \overset{y}{\longrightarrow} \overset{+}{\longrightarrow} \overset{+}$	Marges de sortie Capteurs incertains	T_y
Additif inverse	$u \xrightarrow{+} G_{mod} y$	Incertitudes paramétriques Système instable	$GS_y = S_u G$
Multiplicatif inverse en entrée	$u + \underbrace{\Delta}_{+} \underbrace{G_{mod}}_{y}$	Marges en entrée Actionneurs incertains Système instable	Su
Multiplicatif inverse en sortie	$u \xrightarrow{\qquad } G_{mod} \xrightarrow{+} \xrightarrow{\qquad } y $	Marges en sortie Capteurs incertains Système instable	S_y

Tableau A4-1 : Différents types d'incertitudes non structurées