This document must be cited according to its final version which is the HDR:

Pascal Dufour[1],

« Commande prédictive et identification optimale en boucle fermée»,

Mémoire d'HDR

UCBL1, 29 avril 2011

Comitee members:

Luc DUGARD (DR CNRS au GIPSA-lab UMR CNRS Grenoble, rapporteur),
Hassan HAMMOURI (Prof. des Universités à l'UCBLyon 1, examinateur),
Michel KINNAERT (Prof. des Universités à l'ULBruxelles, rapporteur),
Philippe POIGNET (Prof. des Universités à l'Université Montpellier 2, examinateur),
José RAGOT (Prof. des Universités à l'INPLorraine, rapporteur et président du jury).

All open archive documents of Pascal Dufour are available at:
http://hal.archives-ouvertes.fr/DUFOUR-PASCAL-C-3926-2008

The professional web page (Fr/En) of Pascal Dufour is:
http://www.lagep.univ-lyon1.fr/signatures/dufour.pascal

1
Université de Lyon, Lyon, F-69003, France; Université Lyon 1;
CNRS UMR 5007 LAGEP (Laboratoire d'Automatique et de GEnie des Procédés),
43 bd du 11 novembre, 69100 Villeurbanne, France
Tel +33 (0) 4 72 43 18 45 - Fax +33 (0) 4 72 43 16 99
http://www-lagep.univ-lyon1.fr/ http://www.univ-lyon1.fr http://www.cnrs.fr

UNIVERSITÉ CLAUDE BERNARD LYON 1

Mémoire d'Habilitation à Diriger des Recherches (HDR)

de

Pascal DUFOUR

Section 61 du CNU

Discipline : Automatique

dufour@lagep.univ-lyon1.fr

http ://www.tinyurl.com/dufourpascal

Commande prédictive et identification optimale en boucle fermée

Numéro d'ordre : 10-2011

Soutenance publique le 29 avril 2011, devant le jury composé de :

Luc DUGARD	DR CNRS au GIPSA-lab UMR CNRS Grenoble	Rapporteur
Hassan HAMMOURI	Prof. des Universités à l'UCBLyon 1	Examinateur
Michel KINNAERT	Prof. des Universités à l'ULBruxelles	Rapporteur
Mohammed M'SAAD	Prof. des Universités à l'ENSICaen	Examinateur
Philippe POIGNET	Prof. des Universités à l'Université Montpellier 2	Examinateur
José RAGOT	Prof. des Universités à l'INPLorraine	Rapporteur

Table des matières

Remerciements **vii**

Acronymes **ix**

Table des figures **xiii**

1 Introduction **1**

2 Curriculum Vitae **3**
2.1 État civil 5
2.2 Coordonnées 5
2.3 Poste actuel 5
2.4 Parcours professionnel 6
2.5 Diplômes 6
2.6 Formation continue personnelle 7
2.7 Production scientifique et actions de valorisation de mes résultats . . 7
2.7.1 Bilan comptable 7
2.7.2 Articles de revues internationales avec comité de lecture . . . 9
2.7.3 Création et dépôts de logiciels 10
2.7.4 Articles de revues nationales avec comité de lecture 10
2.7.5 Congrès internationaux avec comité de sélection avec actes . . 11
2.7.6 Congrès nationaux avec comité de sélection avec actes 13
2.7.7 Congrès internationaux avec comité de sélection sans acte . . 14
2.7.8 Congrès nationaux avec comité de sélection sans acte 14
2.7.9 Communications nationales par présentation orale 14
2.7.10 Communication nationale par poster 15
2.7.11 Articles soumis à des revues internationales avec comité de lecture 15
2.7.12 Mémoires 15
2.7.13 Sites internet 15
2.7.14 Divulgations auprès du grand public 16
2.8 Encadrement de jeunes chercheurs 16
2.8.1 Bilan comptable 16
2.8.2 Stage post-doctoral officiellement co-encadré 17
2.8.3 Thèses de doctorat officiellement co-encadrées et soutenues . . 17

2.8.4 Thèse de doctorat officiellement co-encadrée et en cours 18
2.8.5 Thèses de doctorat non officiellement co-encadrées et soutenues 18
2.8.6 Stages de Master Recherche ou de DEA, officiellement encadrés ou co-encadrés et avec mémoire défendu 19
2.9 Collaborations scientifiques 20
2.9.1 Interactions avec d'autres équipes 20
2.9.2 Accueil de chercheurs 21
2.9.3 Programmes d'échanges sortants 21
2.10 Animation scientifique 22
2.10.1 Relecture d'articles 22
2.10.2 Jury de thèse non co-encadrée 23
2.10.3 Jurys de thèses co-encadrées (officiellement ou non) 23
2.10.4 Organisation de manifestations scientifiques 23
2.10.5 Participation à des GDR 23
2.10.6 Participation à des réunions diverses 24
2.10.7 Participation à des sociétés savantes 24
2.11 Responsabilités collectives et administratives 24
2.11.1 Recherche 24
2.11.2 Enseignement 24
2.11.3 Autres 25
2.12 Activités d'enseignement et de formation 26
2.12.1 Service statutaire 26
2.12.2 Mise en place de nouveaux enseignements 26
2.12.3 Production de documents pédagogiques 26
2.12.4 Encadrement de projets 26
2.12.5 Encadrement de stages 27
2.12.6 Formation continue de personnels industriels 27
2.12.7 Formation continue de nouveaux enseignants-chercheurs . . . 27
2.12.8 Formation initiale en dehors de l'établissement 27

3 Introduction à mes activités de recherche 29
3.1 Contexte de mes activités de recherche 29
3.2 Stratégie personnelle de recherche 30

4 Axe de recherche : commande prédictive 33
4.1 Aspects théoriques 35
4.1.1 Introduction 35
4.1.2 Contexte et problématiques 35
4.1.3 Formulation utilisée 37
4.2 Encadrement de jeunes chercheurs : bilan 43
4.3 Thèse (IFP, LGPC, LAGEP) d'Edouard : procédé de dépollution d'air par catalyse 44
4.3.1 Introduction 44
4.3.2 Commande : objectifs et modèle 45
4.3.3 Commande : résultats 50

4.3.4 Conclusion 52
4.4 Thèse (LAGEP) de Da Silva : procédé de polymérisation en émulsion 54
4.4.1 Introduction 54
4.4.2 Commande : objectifs et modèle 54
4.4.3 Commande : résultats 57
4.4.4 Conclusion 62
4.5 Thèse (ADEME, EDF, Dupont, Philipps, LAGEP) de Bombard : procédé de cuisson de peintures en poudre 63
4.5.1 Introduction 63
4.5.2 Commande : objectifs et modèle 64
4.5.3 Commande : résultats 68
4.5.4 Conclusion 72
4.6 Post-doctorat (AUF, LAGEP) de Daraoui : procédé de lyophilisation de produits pharmaceutiques 72
4.6.1 Introduction 72
4.6.2 Commande : objectifs et modèle 73
4.6.3 Commande : résultats 76
4.6.4 Conclusion 78
4.7 Thèse (Soubry, KUL (Belgique)) de De Temmerman : procédé de séchage de pâtes alimentaires 80
4.7.1 Introduction 80
4.7.2 Commande : objectifs et modèle 80
4.7.3 Commande : résultats 82
4.7.4 Conclusion 82
4.8 Développement d'un logiciel : MPC@CB 84
4.9 Publications personnelles dans cet axe 85

5 Axe de recherche : identification optimale en boucle fermée 87
5.1 Aspects théoriques 89
5.1.1 Introduction 89
5.1.2 Contexte et problématiques 89
5.1.3 Formulation proposée 90
5.2 Encadrement de jeunes chercheurs : bilan 91
5.3 Thèse (LAGEP) de Flila 92
5.3.1 Introduction 92
5.3.2 Formulation utilisée 92
5.3.3 Étude de cas : réaction de saponification 96
5.3.4 Étude de cas : procédé de cuisson de peintures en poudre . . . 100
5.3.5 Conclusion 105
5.4 Thèse (LECAP, LAGEP) de Labbane 106
5.4.1 Introduction 106
5.4.2 Sujet et plan 106
5.4.3 Premiers résultats 107
5.5 Développement d'un logiciel : ODOE4OPE 108

5.6 Publications personnelles dans cet axe 108

6 Projets de recherche pour l'avenir **111**
6.1 Introduction 113
6.2 Axe de recherche : identification optimale en boucle fermée 113
6.2.1 Aspects fondamentaux 113
6.2.2 Collaboration et encadrement 114
6.2.3 Commercialisation de logiciel 115
6.3 Axe de recherche : commande prédictive 115
6.3.1 Aspects fondamentaux 115
6.3.2 Collaboration et encadrement 116
6.3.3 Commercialisation de logiciel 116

Bibliographie **119**

7 Sélection de quelques publications personnelles **121**

Remerciements

Je tiens tout d'abord à remercier Luc DUGARD, DR CNRS, et les Professeurs Michel KINNAERT et José RAGOT, qui ont accepté de me faire l'honneur d'être rapporteur de ce mémoire. Je remercie particulièrement Mr Luc DUGARD, pour son travail de relecture qui a contribué à améliorer ce mémoire.

Je tiens aussi à remercier les Professeurs Mohammed M'SAAD, Philippe POIGNET et Hassan HAMMOURI d'avoir acceptés d'être examinateur pour ce jury.

Ce mémoire[1] est en quelque sorte un résumé de mes dix dernières années de recherche, passées au LAGEP. C'est donc le résultat des travaux réalisés avec mes collègues et jeunes chercheurs, qui sont nombreux et qui se reconnaîtront dans ces mots. Qu'ils soient remerciés ici des résultats passés ... en attendant les résultats futurs ! Je n'oublie pas les personnels techniques et administratifs des laboratoires et départements fréquentés : merci à eux, notamment Nadia.

Les diverses facettes de notre vie d'enseignant-chercheur ne sont pas forcément toujours bien connues en dehors de la communauté. Même si ce n'est pas toujours facile, c'est un métier attrayant et riche, où l'on peut s'investir dans divers projets en enseignement et en recherche. Peut être un peu trop parfois, car cela déborde sur certaines soirées et fins de semaine. Le temps est décidément une variable bien indépendante ! Merci donc, à ma famille et à mes amis, pour leur amour et leur support.

A mes parents.
A ma femme Ning.
A ma fille Lucy.
A notre prochain bébé-bonheur ...

1. Ce mémoire a été écrit sous le système Ubuntu avec l'éditeur Kile : merci aux communautés de développeurs pour la création de ces outils performants.

Acronymes

Les acronymes présents dans ce mémoire sont les suivants :

1. Concernant les publications scientifiques où je suis l'un des co-auteurs :
   - ARIACL : Article de revue internationale avec comité de lecture
   - ARNACL : Article de revue nationale avec comité de lecture
   - CIACSAA : Congrès international avec comité de sélection et avec actes
   - CIACSSA : Congrès international avec comité de sélection et sans acte
   - CNACSAA : Congrès national avec comité de sélection et avec actes
   - CNACSSA : Congrès national avec comité de sélection et sans acte
   - CNPO : Communication nationale par présentation orale
   - CNP : Communication nationale par poster

2. Concernant les mémoires scientifiques (DEA, thèse de doctorat) où je suis l'auteur :
   - M : Mémoire

3. Concernant les sociétés savantes auxquelles sont liés les journaux :
   - AIChE : American Institute of Chemical Engineering. Fondé en 1908. http ://www.aiche.org
   - EFCE : European Federation of Chemical Engineering. Fondé en 1953. http ://www.efce.info
   - IEEE : Institute of Electrical and Electronics Engineers, Inc. Fondé en 1884. http ://www.ieee.org
   - IFAC : International Federation of Automatic Control, Fondé en septembre 1957. http ://www.ifac-control.org
   - IIChE : Indian Institute of Chemical Engineering. Fondé en 1947. http ://www.iiche.org.in
   - IMACS : International Association for Mathematics and Computers in Simulation. Fondé en 1955 http ://www.research.rutgers.edu/ imacs
   - SFT : Société Française de Thermique. Fondé en 1961. http ://www.sft.asso.fr

4. Concernant les institutions, universités, laboratoires, écoles, ... :
   - APP : Agence de Protection des Programmes
   - AUF : Agence Universitaire Francophone
   - CIFRE : Convention Industrielle de Formation par la REcherche
   - CPE : école d'ingénieurs en Chimie, Physique et Electronique à Lyon
   - ECL : école d'ingénieurs Ecole Centrale Lyon
   - ECUST : East Chine University of Science and Technology (Shanghai, Chine)
   - EZUS : cellule de valorisation scientifique de l'UCBL1
   - GEP : Génie Electrique et Procédés
   - GSA : Génie des Systèmes Automatisés
   - IFP : Institut Français du Pétrole
   - IITB : Indian Institute of Technology Bombay (Bombay, Inde)
   - KUL : Katholieke Universiteit Leuven (Leuven, Belgique)
   - LAGEP : Laboratoire d'Automatique et de Génie des Procédés (UMR 5005 CNRS UCBL1) à Lyon
   - LECAP : Laboratoire d'Etude et Commande Automatique de Processus (Tunisie)
   - LGPC : Laboratoire de Génie des Procédés Catalytiques (UMR 2214 CNRS CPE) à Lyon
   - LST : Lyon Science Transfert, cellule de valorisation de l'Université de Lyon
   - SKLOCHE : State Key Laboratory of CHemical Engineering (Shanghai, Chine)
   - SNLEP : Systèmes Non Linéaires et Procédés, une des équipes du LAGEP
   - UCBL1 : Université Claude Bernard Lyon 1

Table des figures

2.1 Page ISI WOS de Pascal Dufour http ://www.researcherid.com/rid/C-3926-2008, au 5 janvier 2011. 8

4.1 Schéma de principe du procédé de destruction catalytique des COV. . 46
4.2 Section d'un monolithe. 46
4.3 Perturbation d'entrée $\Delta T_{ad}(t)$: signature du polluant en termes d'élévation adiabatique de la température. 47
4.4 Impact de la perturbation d'entrée sur la sortie (sans action de commande) : température au point chaud. 48
4.5 Schéma de principe du modèle contre courant pseudo-homogène. . . . 49
4.6 Sortie en boucle fermée (sans estimation de la perturbation d'entrée) : température au point chaud. 51
4.7 Sortie en boucle fermée (avec estimation de la perturbation d'entrée) : température au point chaud. 52
4.8 Commande en boucle fermée (avec estimation de la perturbation d'entrée) : refroidissement. 53
4.9 Commande en boucle fermée (avec estimation de la perturbation d'entrée) : chauffage. 53
4.10 Optimisation hors ligne : distribution de tailles des particules finale (haut + : cible, haut continue : solution optimale trouvée), débit optimal de tensioactif trouvé (milieu) et concentration optimale de tensioactif libre trouvée (bas continu) avec CMC (bas trait-point). . . 59
4.11 Sortie avec incertitude (10% et 50%) : trajectoire de référence, réponses du modèle de prédiction, réponses du procédé en boucle fermée (le tout en termes de concentration en tensioactif libre). 60
4.12 Sortie avec incertitude (10% et 50%) : consigne, réponses du modèle de prédiction, réponses du procédé en boucle fermée (le tout en termes de concentration en monomère). 61
4.13 Sortie avec incertitude (10% et 50%) : cible, réponses du modèle de prédiction, réponses du procédé en boucle fermée (le tout en termes de distribution de tailles des particules finale). 61
4.14 Commandes en boucle fermée avec incertitude (10% et 50%) : débit de tensioactif et débit de monomère. 62
4.15 Schéma de principe du procédé pilote de cuisson de peintures en poudre. 64
4.16 Schéma de l'échantillon de peinture déposé sur son support. 65

4.17 Poursuite expérimentale de trajectoire de température (face inférieure) : sortie, pour divers réglages de l'horizon de prédiction. 68
4.18 Poursuite expérimentale de trajectoire de température (face inférieure) : commande, pour divers réglages de l'horizon de prédiction. 69
4.19 Poursuite expérimentale de trajectoire de température (face inférieure) : influence, sur l'erreur de poursuite RCEQMP (en haut) et de l'erreur de modélisation RCEQMM (en bas) de : la couleur réelle de la peinture (blanche (gauche) et noire (droite)), de la valeur du paramètre α_p modélisé (noir (o), moyen($\diamond$), blanc (+)) et de l'horizon de prédiction. 70
4.20 Évolution de la qualité finale (gloss) du film de peinture noire selon la référence de cuisson choisie. 71
4.21 Poursuite expérimentale de trajectoire de température (face inférieure) : sortie, pour diverses trajectoires de référence de cuisson. 71
4.22 Commande en boucle ouverte et impact de l'incertitude de la capacité thermique dans la couche gelée c_{p2} sur : la position du front de sublimation (en haut) et la température à la base du flacon (en bas). 77
4.23 Analyse des résultats en boucle ouverte. 77
4.24 Minimisation sous contraintes du temps de sublimation, sous diverses incertitudes sur c_{p2} : les températures de commande (en haut) et de sortie à la base du flacon (en bas) 78
4.25 Minimisation sous contraintes du temps de sublimation, sous diverses incertitudes sur c_{p2} : la position du front (en haut) et la vitesse du front (en bas) 79
4.26 Analyse des résultats en boucle fermée. 79
4.27 Sortie en boucle ouverte : (u=[49.5 deg C 10.0%]) (x) et (u=[45 deg C 20.0%])]) (-). Sortie en boucle fermée : trajectoire de référence (points), PID multivariable (bleu continu), Prédictive multivariable (rouge continu). 83
4.28 Commande en boucle fermée : PID multivariable (+), Prédictive multivariable (o), et bornes des contraintes. 83
4.29 Comparaison des performances pour diverses structure de commandes. 84

5.1 Sortie en boucle fermée : concentration d'acétate d'éthyle. 98
5.2 Sensibilité de la sortie (concentration d'acétate d'éthyle) par rapport au paramètre inconnu estimé (coefficient d'absorption), en boucle fermée. 99
5.3 Commande optimale en boucle fermée : débit de soude. 99
5.4 Estimation du paramètre inconnu (vitesse de réaction) en boucle fermée. 99
5.5 Sortie en boucle fermée : température face inférieure du support. . . . 103
5.6 Sensibilité de la sortie (température face inférieure du support) par rapport au paramètre inconnu estimé (coefficient d'absorption), en boucle fermée. 103
5.7 Commande en boucle fermée (avec modèle linéarisé temps variant) : flux infra rouge émis. 104
5.8 Commande en boucle fermée (avec modèle non linéaire) : flux infra rouge émis. 104

5.9 Estimation du paramètre inconnu en boucle fermée : coefficient d'absorption. 105

Chapitre 1

Introduction

Je suis maître de conférences en section 61 du CNU, à l'Université Claude Bernard Lyon 1 (UCBL1), affecté au département Génie Electrique et des Procédés (GEP) de la Faculté des Sciences et Technologies (FST) et au Laboratoire d'Automatique et de Génie des Procédés (LAGEP), qui est l'UMR 5007 CNRS-UCBL1.

Je travaille sur des projets de recherche en automatique dans le génie des procédés. Fondamentalement, je m'intéresse aux développements et aux applications d'outils théoriques de commande de procédé : commande prédictive, design en ligne d'expériences optimales couplé à l'identification en ligne de paramètres du modèle dynamique choisi et développement de logiciels (MPC@CB et ODOE4OPE par exemple). Ceci est fortement lié à des problèmes réels issus du génie des procédés. Je développe et j'applique des outils théoriques de commande sur des cas réels en génie des procédés, à travers des projets nécessitant une approche pluridisciplinaire : séchage de peinture, cuisson de polymère, dépollution de gaz par réaction catalytique, digesteur de pulpe à papier, cuisson de peinture, réacteur de polymérisation, lyophilisation de produit pharmaceutique, séchage de pâtes alimentaires ... Ceci en partant de théories variées, pour aller à l'étude en simulation puis à l'implantation de la loi de commande sur le procédé réel.

A partir de problèmes réels traités en génie des procédés, ma stratégie de recherche est de contribuer à travailler à l'amélioration et à l'optimisation des performances de ces procédés vus comme des systèmes continus, via des approches "automatique" en boucle fermée.

J'ai 2 axes de recherche :

- Historiquement, mon premier axe de recherche soutient l'idée de formuler un problème de conduite optimale d'un procédé décrit par des équations aux dérivées partielles, où l'on cherche à obtenir un produit final avec certaines propriétés souhaitées, en un problème de conduite en ligne à résoudre pendant l'exploitation. Cela se traduit alors en problème d'optimisation (poursuite de trajectoire, optimisation de vitesse, ...) avec prise en compte de diverses contraintes (sur les entrées et les sorties). La stratégie de commande prédictive basée sur un modèle est utilisée dans ses travaux. Ma méthode personnelle

a été développée pour des problèmes où le temps nécessaire pour calculer la solution du modèle peut être important (par rapport à la relativement courte période d'échantillonnage) et où quelques itérations sont donc autorisées pour l'optimiseur pour fournir une solution. Par conséquent, l'idée principale de cette méthode est que la tâche d'optimisation soit résolue rapidement et que les contraintes dures soient satisfaites à tout moment, afin que la commande soit physiquement applicable. Par ailleurs, pour les contraintes molles, si elles ne peuvent pas toutes être satisfaites à tout moment, la solution amenant aux moindres violations de contrainte peut être trouvée. Ce dernier point a son utilité, par exemple si, du fait des perturbations ayant un fort impact sur une sortie contrainte, cette contrainte ne peut pas être satisfaite tout le temps.

- Plus récemment, j'ai créé mon second axe de recherche se situant à la frontière entre le design d'expériences optimales et l'identification en ligne de paramètres, le tout basé sur des outils de l'automatique (notamment commande prédictive et observateur). En effet, on peut se trouver en présence de phénomènes dont la modélisation (continue) est soit assez incomplète, soit trop détaillée pour pouvoir identifier tous les paramètres correctement. Dans ce cas, ces incertitudes paramétriques peuvent avoir par la suite un impact non négligeable sur les simulations (boucle ouverte) et les performances de conduite en ligne. L'idée est la suivante : pour une structure de modèle dynamique choisie, l'approche permet de réaliser conjointement l'expérience optimale et l'estimation des paramètres initialement inconnus du modèle. Bien entendu, cette approche est soumise à des hypothèses, mais qui peuvent être vérifiées. Cette approche de commande (conduite) en boucle fermée utilise divers outils de l'automatique avancée, étudiés dans notre équipe au LAGEP : la modélisation de systèmes continus (du temps), l'observateur (capteur logiciel) et la commande prédictive. Les perspectives sont là assez vastes, et c'est principalement dans cet axe (assez original semble t'il) que mes principales activités à court et moyen termes se situent.

Ce mémoire d'HDR est organisé comme suit :

- Tout d'abord, un CV très détaillé permet de faire un bilan des mes activités de recherche (notamment les publications, les projets et les encadrements de jeunes chercheurs), et aussi d'enseignement et d'administration.
- Ensuite, place est faite à la partie recherche avec mes 2 axes de recherche (la commande prédictive et l'identification optimale en boucle fermée) : à chaque fois, il y a une introduction générale, un bilan d'encadrement de jeunes chercheurs puis, pour chaque post-doctorant et doctorant, un résumé des travaux réalisés.
- Enfin, je termine avec quelques perspectives sur ces 2 axes de recherche.
- En annexe, on trouvera une publication par jeune chercheur (post doctorant ou doctorant) que j'ai co-encadré.

Chapitre 2

Curriculum Vitae

Sommaire

2.1 État civil **5**
2.2 Coordonnées **5**
2.3 Poste actuel **5**
2.4 Parcours professionnel **6**
2.5 Diplômes **6**
2.6 Formation continue personnelle **7**
2.7 Production scientifique et actions de valorisation de mes résultats **7**
2.7.1 Bilan comptable 7
2.7.2 Articles de revues internationales avec comité de lecture . 9
2.7.3 Création et dépôts de logiciels 10
2.7.4 Articles de revues nationales avec comité de lecture . . . 10
2.7.5 Congrès internationaux avec comité de sélection avec actes 11
2.7.6 Congrès nationaux avec comité de sélection avec actes . . 13
2.7.7 Congrès internationaux avec comité de sélection sans acte 14
2.7.8 Congrès nationaux avec comité de sélection sans acte . . . 14
2.7.9 Communications nationales par présentation orale 14
2.7.10 Communication nationale par poster 15
2.7.11 Articles soumis à des revues internationales avec comité de lecture 15
2.7.12 Mémoires 15
2.7.13 Sites internet 15
2.7.14 Divulgations auprès du grand public 16
2.8 Encadrement de jeunes chercheurs **16**
2.8.1 Bilan comptable 16
2.8.2 Stage post-doctoral officiellement co-encadré 17
2.8.3 Thèses de doctorat officiellement co-encadrées et soutenues 17
2.8.4 Thèse de doctorat officiellement co-encadrée et en cours . 18

2.8.5 Thèses de doctorat non officiellement co-encadrées et soutenues . . . 18
2.8.6 Stages de Master Recherche ou de DEA, officiellement encadrés ou co-encadrés et avec mémoire défendu . . . 19
2.9 Collaborations scientifiques . . . 20
2.9.1 Interactions avec d'autres équipes . . . 20
2.9.2 Accueil de chercheurs . . . 21
2.9.3 Programmes d'échanges sortants . . . 21
2.10 Animation scientifique . . . 22
2.10.1 Relecture d'articles . . . 22
2.10.2 Jury de thèse non co-encadrée . . . 23
2.10.3 Jurys de thèses co-encadrées (officiellement ou non) . . . 23
2.10.4 Organisation de manifestations scientifiques . . . 23
2.10.5 Participation à des GDR . . . 23
2.10.6 Participation à des réunions diverses . . . 24
2.10.7 Participation à des sociétés savantes . . . 24
2.11 Responsabilités collectives et administratives . . . 24
2.11.1 Recherche . . . 24
2.11.2 Enseignement . . . 24
2.11.3 Autres . . . 25
2.12 Activités d'enseignement et de formation . . . 26
2.12.1 Service statutaire . . . 26
2.12.2 Mise en place de nouveaux enseignements . . . 26
2.12.3 Production de documents pédagogiques . . . 26
2.12.4 Encadrement de projets . . . 26
2.12.5 Encadrement de stages . . . 27
2.12.6 Formation continue de personnels industriels . . . 27
2.12.7 Formation continue de nouveaux enseignants-chercheurs . . . 27
2.12.8 Formation initiale en dehors de l'établissement . . . 27

2.1 État civil

Né le 15/11/1972 à Villefranche sur Saône (69), France

Français, marié, 1 enfant

2.2 Coordonnées

Université Claude Bernard Lyon 1

Campus de la Doua

Laboratoire d'Automatique et de Génie des Procédés (LAGEP), UMR 5007 CNRS

Bureau G 322, Bat. CPE-308G

43 bd du 11 novembre

F-69622 Villeurbanne Cedex

Tel : +33 4 72 43 18 78

Fax : +33 4 72 43 16 99

Mél : dufour@lagep.univ-lyon1.fr

Ma page web au LAGEP : http ://www.tinyurl.com/dufourpascal où l'on trouve mes liens vers : mon site Academia.edu, mon site CiteULike, mon site Connotea, mon site d'archives ouvertes HAL, mon site ResearchID, mon site LinkedIn, mon site PublicationsList, mon site Viadeo, les sites de mes logiciels (MPC@CB, ODOE4OPE) ...

2.3 Poste actuel

Maître de Conférences (depuis le 1er septembre 2001), classe normale, 5ème échelon depuis le 16/11/2008

Section CNU : 61

Établissement public d'affectation statutaire : Université Claude Bernard Lyon 1

Unité de recherche : LAGEP (Laboratoire d'Automatique et de Génie des Procédés), UMR 5007 Université Claude Bernard Lyon 1-CNRS

Membre de l'équipe de recherche "Systèmes non linéaires et procédés" (SNLEP), dirigée par le Professeur Hassan Hammouri

Mes thématiques de recherche :
- Commande prédictive des systèmes à paramètres distribués
- Identification paramétrique optimale en boucle fermée (design d'expériences optimales)
- Simulation numérique et développement de logiciels

– Applications en génie des procédés

Affectation pour l'enseignement : Département Génie Électrique et Procédés (GEP) de l'Université Claude Bernard Lyon 1

Mes thématiques d'enseignement :
– Automatique des systèmes continus et des systèmes logiques
– Automates programmables, interfaces homme machine
– Informatique industrielle, génie informatique

Titulaire de la prime d'encadrement doctoral et de recherche (PEDR) depuis le 1er octobre 2006 (à la 1ère demande), puis de la prime d'excellence scientifique (PES) depuis le 1er octobre 2010.

2.4 Parcours professionnel

Septembre 2001 - aujourd'hui : Maître de Conférences à l'Université Claude Bernard Lyon 1

Juillet 2000 - août 2001 : contrat post-doctoral, Université du Delaware, USA Projet "Contrôle et diagnostic dans un digesteur de pulpe à papier industriel", avec Frank J. Doyle III, responsable du Control Group et Prasad S. Dhurjati, Department of Chemical Engineering. DOE Program/Project Identification No. DE-FC07-00ID-13882

Septembre 1996 - mai 2000 : doctorant de l'Université Claude Bernard Lyon 1

Septembre 1999 - juillet 2000 : demi-ATER au Laboratoire Vision et Robotique (LVR) et à l'IUT de Bourges, Université d'Orléans

Septembre 1996 - août 1999 : allocataire de recherche et moniteur au LAGEP et à l'UFR GEP, Université Claude Bernard Lyon 1

2.5 Diplômes

17 mai 2000 : Thèse de doctorat en Automatique, Université Claude Bernard Lyon 1 obtenue avec mention très honorable. Le sujet portait sur la "Contribution à la commande prédictive des systèmes à paramètres répartis non linéaires". Youssoufi Touré était le directeur de thèse. Les membres du jury étaient : D. Dochain, M. Bergougnioux, G. Gilles, P. Laurent, E. Courtial, Y. Toure

1995 : DEA Automatique et Informatique Industrielle, Université Claude Bernard Lyon 1, 2nd de la promotion de 20 étudiants, mention bien

1994 : Maîtrise Électronique Électrotechnique Automatique (EEA) option automatique et informatique industrielle, Université Claude Bernard Lyon 1, 2nd de la promotion de 140 étudiants, mention bien

1993 : Licence Ingénierie Électrique, Université Claude Bernard Lyon 1, mention assez bien

1992 : DUT Génie Électrique et Informatique Industrielle (GEII), option automatique, Université Claude Bernard Lyon 1

1990 : Bac E, lycée Louis Armand, Villefranche (69)

2.6 Formation continue personnelle

Dans le cadre de ma propre formation continue tout au long de la vie, j'ai suivi à titre personnel quelques stages, qui ont pour le moment traité de valorisation de la recherche :

- 11 janvier 2011 : stage du CNRS Délégation Rhône Auvergne : ‘ ‘Comment diffuser et valoriser les développements logiciel des laboratoires à travers PLUME“
- 27 mars 2009 : stage du CNRS Délégation Rhône Auvergne : “Valorisez vos travaux de recherche : outils et témoignages”
- 12 décembre 2008 : stage de l'URFIST Lyon animé par Jean Pierre Lardy : ”Archives ouvertes, HAL et OAIster“
- 20 octobre 2008 : stage de l'URFIST Lyon animé par Manuel Durand-Barthez : ”Évaluation de la recherche : outils et méthodes en bibliométrie, utilisation des citations“

2.7 Production scientifique et actions de valorisation de mes résultats

2.7.1 Bilan comptable

Au 1er janvier 2011, le bilan comptable de mes 42 références bibliographiques est détaillé comme suit :

- 12 articles de revues internationales avec comité de lecture, dont 7 en 1er auteur, 4 en 2nd auteur, 1 en 3ème auteur
- 2 articles de revues nationales avec comité de lecture, dont 1 en 1er auteur et 1 en 2nd auteur.

- 20 congrès internationaux avec comité de sélection et avec actes, dont 14 labellisés (3 IFAC , 2 conjoints IEEE/IFAC, 5 IEEE, 1 conjoint IMACS/IEEE, 3 EFCE), dont 9 en 1er auteur et 11 en 2nd auteur.
- 3 communications en congrès nationaux avec comité de sélection et avec actes, toutes labellisés (2 SFT, 1 GDR MACS)
- 4 communications en congrès internationaux avec comité de sélection et sans acte, dont 2 labellisés (1 AIChE , 1 conjoint AIChE/IIChE), dont 2 en 1er auteur et 2 en 2nd auteur.
- 1 communication en congrès national avec comité de sélection et sans acte, en 1er auteur.

Dans la très grande majorité des cas, je suis assez souvent 1er auteur et plus souvent l'auteur correspondant.

En termes de facteur bibliométrique[1] H[2], au 5 janvier 2011, sur l'ensemble de mes travaux publiés, 10 sont utilisés par Thomson ISI WOS (cf. figure 2.1) pour calculer mon impact scientifique. Ces 10 articles sont cités en tout 123 fois, 5 articles sont au moins cités 12 fois et mon article le plus cité l'est 28 fois (publié en 2003). Depuis 2006, je suis en moyenne cité 20 fois par an. Mon facteur H vaut 7 (source http ://www.researcherid.com/rid/C-3926-2008).

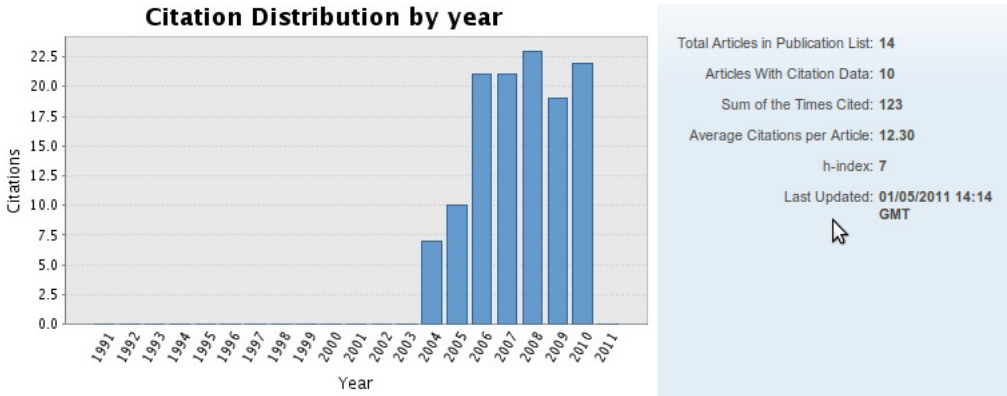

FIGURE 2.1 – Page ISI WOS de Pascal Dufour http ://www.researcherid.com/rid/C-3926-2008, au 5 janvier 2011.

Dans ce qui suit, chaque référence se termine par un lien vers les archives ouvertes (OAI) du CNRS : il suffit de taper le numéro dans un moteur de recherche pour trouver le papier.

1. Rapport de l'Académie des Sciences de France, L'évaluation individuelle des chercheurs et des enseignants-chercheurs en sciences exactes et expérimentales remis le 08 juillet 2009 à Madame la Ministre de l'Enseignement Supérieur et de la Recherche

2. J.E. Hirsch, 2005. An index to quantify an individual research output, Proceedings of the National Academy of Sciences, 102, 16569-16572

2.7.2 Articles de revues internationales avec comité de lecture

2.7.2.1 Sur mes travaux d'après post-doctorat et d'après thèse

ARIACL12 N. Daraoui, P. Dufour, H. Hammouri, A. Hottot, "Model predictive control during the primary drying stage of lyophilisation", Control Engineering Practice, 2010, 18(5), 483-494 DOI : 10.1016/j.conengprac.2010.01.005 OAI : hal-00434481

ARIACL11 I. Bombard, B. Da Silva, P. Dufour and P. Laurent, "Experimental predictive control of the infrared cure of a powder coating : a non-linear distributed parameter model based approach", Chemical Engineering Science Journal, 2010, 65(2), 962-975. DOI :10.1016/j.ces.2009.09.050 ISSN : 0009-2509 OAI : hal-00434469

ARIACL10 J. De Temmerman, P. Dufour, B. Nicolaï, H. Ramon, "MPC as control strategy for pasta drying processes", Computers and Chemical Engineering, 2009, 33(1), 50-57. DOI : 10.1016/j.compchemeng.2008.06.004 ISSN : 0098-1354 OAI : hal-00350086

ARIACL09 P. Dufour, "Control engineering in drying technology : Review and trends, special issue of Drying Technology on Progress in Drying technologies (5), 24(7), pp. 889 - 904, 2006. DOI : 10.1080/07373930600734075 ISSN (printed) : 0737-3937. ISSN (electronic) : 1532-2300 OAI : hal- 00350094

ARIACL07 D. Edouard, P. Dufour, H. Hammouri, "Observer based multivariable control of a catalytic reverse flow reactor : comparison between LQR and MPC approaches", Computers and Chemical Engineering, 29(4), pp. 851-865, 2005. DOI : 10.1016/j.compchemeng.2004.09.018 ISSN : 0098-1354 OAI : hal-00091715

2.7.2.2 Sur mes travaux de post-doctorat

ARIACL08 P. Dufour, S. Bhartiya, P.S. Dhurjati, F.J. Doyle III, "Neural network-based software sensor : Data set design and application to a continuous pulp digester", Control Engineering Practice, 13(2), pp. 135-143, 2005. DOI : 10.1016/j.conengprac.2004.02.013 ISSN : 0967-0661 OAI : hal-00351646

ARIACL03 S. Bhartiya, P. Dufour, F.J. Doyle III, "Fundamental thermal-hydraulic continuous pulp digester model with grade transition", American Institute of Chemical Engineers (AIChE) Journal, 49(2), pp. 411-425, 2003. DOI : 10.1002/aic.690490212 ISSN : 0001-1541 OAI : hal-00352339

2.7.2.3 Sur mes travaux de thèse

ARIACL06 P. Dufour, D. Blanc, Y. Touré, P. Laurent, "Infrared drying process of an experimental water painting : Model predictive control", Drying Technology, 22(1-2), pp. 269-284, 2004. DOI : 10.1081/DRT-120028233 ISSN (printed) : 0737-3937. ISSN (electronic) : 1532-2300 OAI : hal-00352372

ARIACL05 P. Dufour, Y. Touré, "Multivariable model predictive control of a catalytic reverse flow reactor", Computers and Chemical Engineering, 28(11), pp. 2259-2270, 2004. DOI : 10.1016/j.compchemeng.2004.04.006 ISSN : 0098-1354 OAI : hal-00351742

ARIACL04 P. Dufour, Y. Touré, D.J. Michaud, P.S. Dhurjati, "A partial differential equation model predictive control strategy : Application to autoclave composite processing", Computers and Chemical Engineering, 28(4), pp. 545-556, 2004. DOI : 10.1016/j.compchemeng.2003.08.007 ISSN : 0098-1354 OAI : hal-00351748

ARIACL02 P. Dufour, F. Couenne, Y. Touré "Model predictive control of a catalytic reverse flow reactor", IEEE Transactions on Control Systems Technology (TCST), special issue on Control of Industrial Spatially Distributed Parameter Processes, 11(5), pp. 705-714, 2003. DOI : 10.1109/TCST.2003.816408 ISSN : 1063-6536 OAI : hal-00338368

ARIACL01 P. Dufour, Y. Touré, D. Blanc, P. Laurent "On nonlinear distributed parameter model predictive control strategy : On-line calculation time reduction and application to an experimental drying process", Computers and Chemical Engineering, 27(11), pp. 1533-1542, 2003. DOI : 10.1016/S0098-1354(03)00099-1 ISSN : 0098-1354 OAI : hal-00352371

2.7.3 Création et dépôts de logiciels

- Décembre 2010 : demande de dépôt, à l'Agence de Protection des Programmes, d'un logiciel d'aide automatisée à l'identification optimale en boucle fermée (ODOE4OPE [3]), via LST le 9 décembre 2010 (L829)
  Plus d'informations sur ce logiciel sur http ://ODEO4OPE.univ-lyon1.fr
- Janvier 2007 : dépôt d'un logiciel de commande prédictive MPC@CB [4], déposé auprès d'EZUS Lyon 1 (enveloppe SOLEAU), et demandé à être redéposé, via LST le 26 octobre 2010 (L603), à l'Agence de Protection des Programmes.
  Ce logiciel fait l'objet en 2010 et 2011 d'un financement de l'ordre de 50kE par LST pour passer les codes sources Matlab dans un logiciel exploitable commercialement en dehors de Matlab (1 tiers des projets retenus).
  Plus d'informations sur ce logiciel sur http ://MPC-AT-CB.univ-lyon1.fr

2.7.4 Articles de revues nationales avec comité de lecture

2.7.4.1 Sur mes travaux d'après post-doctorat et d'après thèse

ARNACL02 E. Courtial, P. Dufour,Y. Touré, "Commande prédictive non linéaire sous contraintes : une condition de faisabilité", Sciences et Technologies de lAutomatique (e-STA), 1(4), 2004. ISSN : 1954-3522 OAI : hal-00352333

3. Optimal Design Of Experiments For Online Parameter Estimation
4. Model Predictive Control at Claude Bernard

2.7.4.2 Sur mes travaux de DEA

ARNACL01 P. Dufour, L. Josserand, Y. Touré, "Commande par actions frontières d'un système d'échangeurs de chaleur", RAIRO-APII-JESA, 30(10), pp. 1375-1391, 1996. ISSN : 0296-1598 OAI : hal- 00352373

2.7.5 Congrès internationaux avec comité de sélection avec actes

2.7.5.1 Sur mes travaux d'après post-doctorat et d'après thèse

CIACSAA 20 P. Dufour, S. Flila, H. Hammouri, "Nonlinear observers synthesis based on strongly persistent inputs ", Proceedings of the 29th IEEE-CSS Chinese Control Conference (CCC) 2010, Paper 307, pp. 316-320, Beijing, China, July 29-31, 2010. OAI : hal-00469595

CIACSAA 19 S. Flila, P. Dufour, H. Hammouri, M Nadri, "Closed loop optimal design of experiments for online identification ", Proceedings of the 29th IEEE-CSS Chinese Control Conference (CCC) 2010, Paper 194, pp.1178-1183, Beijing, China, July 29-31, 2010. OAI : hal-00469590

CIACSAA 18 S. Flila, P. Dufour, H. Hammouri, "Identification optimale en boucle fermée pour les systèmes non linéaires ", Actes de la 6ième IEEE Conférence Internationale Francophone d'Automatique (CIFA),Papier 18, Nancy, France, 2-4 juin 2010. OAI : hal-00458667

CIACSAA17 N. Daraoui, P. Dufour, H. Hammouri, Benefits in using model based predictive control during drying and lyophilisation, Proceedings of the 3rd European Drying Conference joint conference of the Association Française de Séchage dans l'Industrie et l'Agriculture (AFSIA) and European European Federation of Chemical Engineering (EFCE), Cahier de l'AFSIA 23, vol. 1, pp. 100-101, Lyon, France, 14-15 mai 2009. OAI : hal-00388216

CIACSAA16 B. Da Silva, P. Dufour, N. Othman, S. Othman, "Model predictive control of free surfactant concentration in emulsion polymerization ", Proceedings of the 17th IFAC World Congress 2008, Paper 1693, pp. 8375-8380, Seoul, South Korea, July 6-11, 2008. DOI : 10.3182/20080706-5- KR-1001.1693 OAI : hal-00352737

CIACSAA15 S. Flila, P. Dufour, H. Hammouri, "Optimal input design for on-line identification : a coupled observer-MPC approach ", Proceedings of the 17th IFAC World Congress 2008, Paper 1722, pp. 11457-11462, Seoul, South Korea, July 6-11, 2008. DOI : 10.3182/20080706-5-KR-1001.1722 OAI : hal-00352751

CIACSAA14 B. Da Silva, P. Dufour, N. Othman, S. Othman, "MPC@CB Software : A solution for Model Predictive Control ", Proceedings of the 18th EFCE-European Symposium on Computer Aided Process Engineering (ESCAPE) 2008, vol. 25, pp. 659-664, Lyon, France, June 1-4 2008. DOI : 10.1016/S1570-7946(08)80115-0 OAI : hal-00352476

CIACSAA13 N. Daraoui, P. Dufour, H. Hammouri, A. Hottot, "Optimal operation of sublimation time of the freeze drying process by predictive control : Application of the MPC@CB Software ", Proceedings of the 18th EFCE-European Symposium on Computer Aided Process Engineering (ESCAPE) 2008, vol. 25, pp. 453-458, Lyon, France, June 1-4 2008. DOI : 10.1016/S1570-7946(08)80080-6 OAI : hal-00352454

CIACSAA12 N. Daraoui, P. Dufour, H. Hammouri, "Model predictive control of the primary drying stage of the drying of solutions in vials : an Application of the MPC@CB Software (Part 1) ", Proceedings of the 5th Asia-Pacific Drying Conference (ADC) 2007, vol. 2, pp. 883-888, Hong Kong, China, August ,13-15 2007. DOI : 10.1142/97898127719570129 OAI : hal-00352431

CIACSAA11 K. Abid, P. Dufour, I. Bombard, P. Laurent, "Model predictive control of a powder coating curing process : an Application of the MPC@CB© Software ", Proceedings of the 26th IEEE Chinese Control Conference (CCC) 2007, Zhangjiajie, China, vol. 2, pp. 630-634, July 27-29 2007. DOI : 10.1109/CHICC.2006.4346973 OAI : hal-00338891

CIACSAA10 P. Dufour, "Control engineering in drying technology from 1979 to 2005 : Review and trends", Proceedings of the 15th International Drying Symposium (IDS) 2006, vol. B, pp. 732-739, Budapest, Hungary, august 21-23, 2006. OAI : hal-00354351

CIACSAA09 P. Dufour, P. Laurent, C.Z. Xu, "Observer based model predictive control of the water Based painting drying using a humidity profile soft sensor and a temperature measurement", Proceedings of the 1st International Workshop and Symposium on Industrial Drying (IWSID) 2004, paper SY152, Mumbai, India, december 20-23, 2004. OAI : hal-00353098

CIACSAA08 E. Courtial, P. Dufour, Y. Touré, "Commande prédictive non linéaire sous contraintes : Une condition de faisabilité", Proceedings of the 3rd IEEE Conference Internationale Francophone d'Automatique (CIFA) 2004, paper 223, Douz, Tunisia, november 22-24,2004. OAI : hal-00352421

CIACSAA07 P. Dufour, P. Laurent, C.Z. Xu, "Model predictive control of the water based painting drying using a humidity profile soft Sensor and a temperature measurement", Proceedings of the 14th International Drying Symposium (IDS) 2004, vol. B, pp. 911-918, Sao Paulo, Brazil, august 22-25, 2004. OAI : hal-00353084

CIACSAA06 P. Dufour, D. Blanc, Y. Touré, P. Laurent, "Model predictive control for an infrared drying process of a water based epoxy amine painting", Proceedings of the 13th International Drying Symposium (IDS) 2002, vol. B, pp. 1147-1154, Beijing, PRC, august 27-30, 2002. OAI : hal-00353067

2.7.5.2 Sur mes travaux de post-doctorat

CIACSAA04 P. Dufour, S. Bhartiya, T.J. English, E.P. Gaztke, P.S. Dhurjati, F.J. Doyle III, "Faults detection of the continuous pulp digester", Proceedings of the 4th IFAC Workshop on on-line fault detection and super vision in the chemical

process industries (CHEMFAS - 4), pp. 106-111, Jejudo Island, South Korea, june 7-8, 2001. OAI : hal-00353060

2.7.5.3 Sur mes travaux de thèse

CIACSAA05 P. Dufour, E. Courtial, Y. Touré, P. Laurent, "Trajectory tracking strategy for a nonlinear distributed parameter process", Proceedings of the 6th IFAC-IEEE European Control Conference (ECC) 2001, Paper 4993, Porto, Portugal, september 4-7, 2001. OAI : hal-00353049

CIACSAA03 M.C. Larabi, P. Dufour, P. Laurent, Y. Touré, "Predictive control of a nonlinear distributed parameter system : Real time control of a painting film drying process", Proceedings of the 14th Mathematical Theory on Network and Systems (MTNS), Paper B167, Perpignan, France, june 19- 23, 2000. OAI : hal-00352768

CIACSAA02 P. Dufour, Y. Touré, D.J. Michaud, P.S. Dhurjati, "Optimal trajectory determination and tracking of an autoclave curing process : A model based approach", Proceedings of the 5th IFAC-IEEE European Control Conference (ECC), Paper F1033-6, Karlsruhe, Germany, august 31-september 3, 1999. OAI : hal-00353148

CIACSAA01 P. Dufour, Y. Touré, P. Laurent, "A nonlinear distributed parameter process control : An internal linearized model control approach", Proceedings of the 2nd IMACS-IEEE Computational Engineering in Systems Applications (CESA) Multiconference, vol. 1, pp. 134-138, Hammamet, april 1- 4, 1998. OAI : hal-00353142

2.7.6 Congrès nationaux avec comité de sélection avec actes

2.7.6.1 Sur mes travaux d'après post-doctorat et d'après thèse

CNACSAA03 W. Labbane, P. Dufour, A.S. Tlili, H. Hammouri, N. Ben Hadj Braiek, "Approches d'automatique pour le design de plan d'expériences couplé à l'identification : état de l'art", accepté aux 3èmes Journées Identification et Modélisation Expérimentale (JIME), référence 5, Douai, France, 6-7 avril 2011

CNACSAA02 B. Da Silva, I. Bombard, P. Dufour, P. Laurent, "Etude expérimentale de la robustesse d'une commande prédictive d'un procédé de cuisson sous infrarouge de peintures en poudre", Société Française de Thermique (SFT), papier 53, Vannes, France, 26-29 mai 2009 OAI : hal-00406107

CNACSAA01 I. Bombard, B. Da Silva, P. Dufour, P. Laurent, J. Lieto, "Contrôle par commande prédictive d'un procédé de cuisson sous infrarouge de peintures en poudre", Société Française de Thermique (SFT), papier 130 (cdrom), Toulouse, France, 3-6 juin 2008 OAI : hal-00352412

2.7.7 Congrès internationaux avec comité de sélection sans acte

2.7.7.1 Sur mes travaux d'après post-doctorat et d'après thèse

CIACSSA04 P. Dufour, D. Edouard, H. Hammouri, "Multivariable control of a catalytic reverse flow reactor : Comparison between LQR and MPC approaches", ChemCon'04-First joint meeting of American Institute of Chemical Engineers (AIChE) and Indian Institute of Chemical Engineers (IIChE), Mumbai, India, december 27-30, 2004. OAI : hal-00353076

2.7.7.2 Sur mes travaux de post-doctorat

CIACSSA03 S. Bhartiya, P. Dufour, F.J. Doyle III, "Thermal-hydraulic digester model using a higher order numerical method", American Institute of Chemical Engineers (AIChE) Fall meeting, Reno, Nevada, USA, november 5-7, 2001. OAI : hal-00353102

CIACSSA02 P. Dufour, S. Bhartiya, P.S. Dhurjati, F.J. Doyle III, "A neural network approach for the diagnosis of the continuous pulp digester", Digester Workshop, Annapolis, MD, USA, june 28, 2001. OAI : hal-00352521

CIACSSA01 S. Bhartiya, P. Dufour, F.J. Doyle III, "Thermal-hydraulic modeling of a continuous pulp digester", Digester Workshop, Annapolis, MD, USA, june 28, 2001. OAI : hal-00353106

2.7.8 Congrès nationaux avec comité de sélection sans acte

2.7.8.1 Sur mes travaux d'après post-doctorat et d'après thèse

CNACSSA01 P. Dufour, D. Edouard, H. Hammouri, "Destruction of volatile organic compounds by the optimal multivariable control of a catalytic reverse flow reactor", 5ème édition des journées STIC & Environnement, Lyon, 13-15 novembre 2007. OAI : hal-00353129

2.7.9 Communications nationales par présentation orale

CNPO04 P. Dufour, "Commande prédictive pour la lyophilisation de produits pharmaceutiques", GDR MACS-CPNL, Paris, 15 juin 2007.

CNPO03 P. Dufour, "Commande à horizon glissant d'un système d'équations aux dérivées partielles non linéaires : Commande d'un réacteur à inversion de flux.", GDR MACS-CPNL , Paris, 20 février 2003.

CNPO02 P. Dufour, "Application de la stratégie de commande prédictive à des systèmes à paramètres répartis non linéraires", GDR MACS-EDP , Paris, 16 décembre 1999.

CNPO01 P. Dufour, M. Larabi, P. Laurent, Y. Touré, "Poursuite d'une trajectoire de température : application de la commande prédictive à un procédé de séchage

par infrarouge", concours du prix de thèse SFGP/GEC2 lors du 2nd Congrès Européen de Génie des Procédés (ECCE), Montpellier, France, 5-7 octobre 1999.

2.7.10 Communication nationale par poster

CNPP01 S. Flila, P. Dufour, H. Hammouri, "Design d'expérience optimale : identification paramétrique en ligne par une approche de conduite automatisée", 2nde édition de la Journée de lInstitut de Chimie de Lyon (ICL) , Lyon, France, 7 Décembre 2009. OAI : hal-00438457

2.7.11 Articles soumis à des revues internationales avec comité de lecture

2.7.11.1 Sur mes travaux d'après post-doctorat et d'après thèse

ARIACLS2 B. Da Silva, P. Dufour, N. Othman, S. Othman, "Inferential MIMO predictive control of the particle size distribution in emulsion polymerization", soumis à Computers and Chemical Engineering, numéro 6345, 6 novembre 2010

ARIACLS1 P. Dufour, S. Flila, H. Hammouri, "High gain observer for non uniformly observable MIMO systems", soumis à IEEE Transactions on Automatic Control (TAC), TN-10-633, 21 octobre 2010 (relectures favorables pour une version 2, en cours de rédaction).

2.7.12 Mémoires

M02 17 Mai 2000 : P. Dufour : "Contribution à la commande prédictive des systèmes à paramètres répartis non linéaires", thèse de doctorat de l'UCBL1, encadré par Y. Touré. OAI : tel-00337724

M01 Juillet 1995 : P. Dufour : "Commande par actions frontières d'un système à paramètres distribués", rapport de stage de fin d'études de DEA Automatique et Informatique Industrielle, UCBL1, co-encadré par L. Gery-Josserand, Y. Touré. OAI : dumas-00354306

2.7.13 Sites internet

Depuis fin 2008, j'ai entrepris d'être plus présent sur internet, afin de mieux valoriser mes activités et résultats. Je suis donc présent sur une dizaine de sites, principalement liés à des réseaux scientifiques.

- Page web professionnelle au LAGEP :
  http ://www.lagep.univ-lyon1.fr/signatures/Dufour.Pascal
  accessible en raccourci par http ://www.tinyurl.com/DufourPascal
- Mes archives ouvertes : http ://hal.archives-ouvertes.fr/DUFOUR-PASCAL-C-3926-2008

- Mon ISI WOS ResearchID : http ://www.researcherid.com/rid/C-3926-2008
- Mon logiciel MPC@CB : http ://MPC-AT-CB.univ-lyon1.fr
- Mon logiciel ODOE4OPE : http ://ODOE4OPE.univ-lyon1.fr
- Sur Academia : http ://univ-lyon1.academia.edu/PascalDufour
- Sur CiteULike : http ://www.citeulike.org/user/DufourPascal
- Sur Connotea : http ://www.connotea.org/user/PascalDufour
- Sur Viadeo : http ://www.viadeo.com/en/profile/Pascal.Dufour7
- Sur LinkedIn : http ://www.linkedin.com/in/DufourPascal
- Sur JournalDuNet : http ://reseau.journaldunet.com/membre/12191179/1027728062/Pascal_Dufour
- Sur PublicationsList : http ://publicationslist.org/pascal-dufour
- Sur ResearchGate : http ://www.researchgate.net/profile/Pascal_Dufour

2.7.14 Divulgations auprès du grand public

- 5-6 octobre 2010 : présentation de MPC@CB au salon de l'innovation Grenoble Innovation Fair (GIF), Alpexpo, Grenoble
- 5-6 mai 2010 : présentation de MPC@CB au salon professionnel Carnot 2010, espace Double Mixte, Villeurbanne
- 1 décembre 2009 : présentation de MPC@CB à la "vitrine techno" du colloque du numérique, Eurexpo, Lyon

2.8 Encadrement de jeunes chercheurs

2.8.1 Bilan comptable

Depuis mon affectation au poste de maître de conférences en 2001, mon bilan d'encadrement de 7 jeunes chercheurs se mesure à divers niveaux :

- Stage post-doctoral : 1 pendant toute sa durée de 10 mois.
- Thèses de doctorat officiellement co-encadrées : 2 soutenues et 1 en cours (démarrée au printemps 2010).
- Thèses de doctorat non officiellement co-encadrées : 3 (avec publications à l'issue).
- Stagiaires de DEA/M2R : en moyenne 1 par an.

Les détails de ces encadrements de jeunes chercheurs sont listés ci-dessous, avec notamment mon taux de participation, les références vers le mémoire, les publications qui en sont sorties et la position professionnelle actuelle (si connue) de ce jeune chercheur.

2.8.2 Stage post-doctoral officiellement co-encadré

SPDOCE01 Du 1er octobre 2006 au 30 juillet 2007, Nawal Daraoui, "Commande prédictive en lyophilisation de produits pharmaceutique", financé par une bourse de l'Agence Universitaire Francophone (AUF), co-encadré par le Prof. H. Hammouri et P. Dufour (65 %).
Ce travail a donné lieu à 1 article de revue internationale avec comité de lecture [ARIACL12] [5] et à 3 communications publiées lors de congrès internationaux avec comité de sélection et avec actes [CIACSAA17, CIACSAA13, CIACSAA12] [6] .
Nawal Daraoui a poursuivi par un post doctorat (de septembre 2007 à mai 2008) au GIPSA Grenoble et est contractuelle depuis juin 2008 à l'UC3M, Espagne.

2.8.3 Thèses de doctorat officiellement co-encadrées et soutenues

TDOCES02 De janvier 2006 au 5 février 2010, Saida Flila : "Identification optimale et commande prédictive : application en génie des procédés" , thèse de l'UCBL1 au LAGEP co-encadrée par le Prof. H. Hammouri et P. Dufour (50 %). OAI : tel-00458661
Ce travail a donné lieu à 4 communications à un congrès international avec comité de sélection et actes [CIACSAA20, CIACSAA19, CIACSAA18, CIACSAA15] [7] . 1 publication dans une revue internationale à comité de lecture a été soumise à l'automne 2010 [ARIACLS1] [8] .
Saida Flila a poursuivi avec un ATER de septembre 2009 à juillet 2010 à l'Université de Bourgogne.

TDOCES01 Du 1er octobre 2005 au 5 décembre 2008, Bruno Da Silva : "Estimation et contrôle de la distribution de la taille des particules lors des procédés de polymérisation en émulsion", thèse de l'UCBL1 au LAGEP co-encadrée par N. Othman (HDR), S. Othman (HDR), et P. Dufour (40 %). OAI : tel-00347760
Ce travail a donné lieu à 2 communications à des congrès internationaux avec comité de sélection et actes [CIACSAA16, CIACSAA14] [9] . 1 publication dans une revue internationale à comité de lecture a été soumise à l'automne 2010 [ARIACLS2] [10] .
Bruno Da Silva est en poste depuis mars 2009 dans l'industrie en France (ECOREN, société issue de l'IFP).

5. Publication personnelle : référence complète dans la partie CV (2.7).
6. Publication personnelle : référence complète dans la partie CV (2.7).
7. Publication personnelle : référence complète dans la partie CV (2.7).
8. Publication personnelle : référence complète dans la partie CV (2.7).
9. Publication personnelle : référence complète dans la partie CV (2.7).
10. Publication personnelle : référence complète dans la partie CV (2.7).

2.8.4 Thèse de doctorat officiellement co-encadrée et en cours

TDOCEEC01 De février 2010 à février 2013, Walid Labbane : "Conduite optimale automatisée de plan d'expériences pour l'identification paramétrique", cotutelle de thèse entre l'ENI de Tunis (Université Tunis El Manar- École Polytechnique de Tunisie - Laboratoire d'Etude et Commande Automatique de Processus (LECAP)) et l'UCBL1 (LAGEP) co-encadrée par le Prof. H. Hammouri, le Prof. Naceur Benhadj Braiek, Ali Sghaier Tlili et P. Dufour (25 %).
1 communication à une conférence nationale avec comité de sélection et actes vient d'être acceptée [CNACSAA03] [11] .
Walid Labbane est actuellement enseignant contractuel à l'ESC Tunis.

2.8.5 Thèses de doctorat non officiellement co-encadrées et soutenues

TDNOCES03 De janvier 2007 au 6 octobre 2008, Jeroen de Temmerman : "Development of a drying model for the moisture concentration in pasta with control design of the drying air properties", thèse de la Katholieke Universiteit Leuven (KUL), division mécatronique, bio-statistique et capteurs (MeBioS), ISBN 978-90-8826-057-5, co-encadrée par Prof H. Ramon (KUL), B. Nicolaï (KUL). http ://hdl.handle.net/1979/1910
Ce travail a donné lieu à 1 article de revue internationale avec comité de lecture [ARIACL10] [12] .
Jeroen de Temmerman est en poste depuis juillet 2008 dans l'industrie en Belgique (Dsquare).

TDNOCES02 De mai 2006 au 29 novembre 2007 : Isabelle Bombard : "Modélisation expérimentale et théorique de la cuisson de peintures en poudre", thèse de l'UCBL1 au LAGEP co-encadrée par l'ADEME et 3 industriels (EDF, Dupont Coatings et Philipps), et par le Prof. J. Lieto et P. Laurent (tout deux du LAGEP).
Ce travail a donné lieu à 1 article de revue internationale avec comité de lecture [ARIACL11] [13] , 1 communication publiée lors d'un congrès international avec comité de sélection et actes [CIACSAA11] [14] , et 2 communications publiées lors de congrès nationaux avec comité de sélection et actes [CNACSAA02, CNACSAA01] [15] .
Isabelle Bombard est en poste depuis le printemps 2008 dans l'industrie au Canada (SOUTEX).

TDNOCES01 D'octobre 2002 à octobre 2003 : David Edouard : "'Modélisation et supervision d'un réacteur à inversion de flux pour la destruction de composés organiques", thèse de CPE au LGPC co-encadrée par le Prof. D. Schweich (LGPC) et le

11. Publication personnelle : référence complète dans la partie CV (2.7).
12. Publication personnelle : référence complète dans la partie CV (2.7).
13. Publication personnelle : référence complète dans la partie CV (2.7).
14. Publication personnelle : référence complète dans la partie CV (2.7).
15. Publication personnelle : référence complète dans la partie CV (2.7).

Prof. H. Hammouri (LAGEP).
Ce travail a donné lieu à 1 article de revue internationale avec comité de lecture [ARIACL07] [16] , 1 communication publiée lors d'un congrès international avec comité de sélection et sans acte [CIACSSA04] [17] , et 2 communications publiées lors de congrès nationaux avec comité de sélection et sans acte [CNACSSA01] [18] .
David Edouard est actuellement Maître de Conférences à l'Université de Strasbourg (LMSPC, UMR 7515 CNRS).

2.8.6 Stages de Master Recherche ou de DEA, officiellement encadrés ou co-encadrés et avec mémoire défendu

J'encadre de l'ordre d'un stagiaire de M2R/DEA par an (si cela n'est pas précisé, les co-encadrants sont des membres du LAGEP) :

SM2DEA09 printemps 2009 : Firas Rouissi, "Commande prédictive d'un système biologique : comparaison entre les approches par linéarisation et non linéaire", rapport de stage de fin d'études de Master STS mention Génie Electrique Génie des Procédé, parcours Génie des Systèmes Automatisés UCBL1, co-encadré par M. Nadri-Wolf et P. Dufour (50%) OAI : dumas-00407321
En septembre 2009, a débuté une thèse de doctorat avec Ghaleb.Hoblos@esigelec.fr au laboratoire Institut de recherche en Systèmes Électroniques Embarqués (IRSEEM) 4353, Rouen.

SM2DEA08 printemps 2007 : Mustapha Balhousse, "Commande prédictive expérimentale d'un modèle de cuisson de peinture en poudre par infrarouge", rapport de stage de fin d'études de Master STS mention Génie Electrique Génie des Procédé, parcours Génie des Procédés, UCBL1, co-encadré par P. Laurent, I. Bombard, B. Da Silva et P. Dufour (30%) OAI : dumas-00353473

SM2DEA07 printemps 2006 : Kamel Abid, "Commande prédictive sur un procédé de cuisson de peinture en poudre avec de l'infrarouge", rapport de stage de fin d'études de Master ST mention Sciences de l'Information, des Dispositifs et des Systèmes, parcours Génie des Procédés de l'UCBL1, co-encadré par P. Laurent, I. Bombard et P. Dufour (80%) OAI : dumas-00347670.
Cela a donné lieu à 1 communication publiée lors d'un congrès international avec comité de sélection et actes [CIACSAA11].
En mars 2010, Kamel Abid était en poste dans le privé en tant qu'ingénieur d'études et de développement en informatique de gestion.

SM2DEA06 printemps 2006 : Jiang Lukan, "On line monitoring of crystallization process using FBRM and artificial neural network", rapport de stage de fin d'études de Master ST mention Sciences de l'Information, des Dispositifs et des Systèmes, parcours Génie des Systèmes Automatisés de l'UCBL1, co-encadré par

16. Publication personnelle : référence complète dans la partie CV (2.7).
17. Publication personnelle : référence complète dans la partie CV (2.7).
18. Publication personnelle : référence complète dans la partie CV (2.7).

G. Fevotte, S. Bhartiya (IIT Bombay, Inde) et P. Dufour (60%) OAI : dumas-00347689
Malgré une offre de thèse, elle est rentrée en Chine pour raison familiale.

SM2DEA05 printemps 2006 : Mouhssine Benzekri, "Synthèse d'observateur pour un séchoir", rapport de stage de fin d'études de Master ST mention Sciences de l'Information, des Dispositifs et des Systèmes, parcours Génie des Systèmes Automatisés de l'UCBL1, co-encadré par M. Nadri et P. Dufour (40%) OAI : dumas-00353864

SM2DEA04 printemps 2005 : Tarik Hamane, "Contrôle et synthèse d'une loi de commande de suspensions d'un moteur", rapport de stage de fin d'études de Master ST mention Sciences de l'Information, des Dispositifs et des Systèmes, parcours Génie des Systèmes Automatisés de l'UCBL1, co-encadré par Y. Legorrec et P. Dufour (60%) OAI : dumas-00353582
Tarik Hamane a poursuivi par une thèse au LAPP (UMR 5814 à Annecy).

SM2DEA03 printemps 2004 : Rachid Errouissi, "Commande prédictive d'un canal d'irrigation", rapport de stage de DEA Ingénierie des Systèmes Automatisés de l'UCBL1, co-encadré par L. Lefèvre et P. Dufour (60%) OAI : dumas-00353857.
Rachid Errouissi a poursuivi par une thèse au LICOME (Université du Québec à Chicoutimi).

SM2DEA02 printemps 2003 : Brahim Boussaoud, "Diagnostic en Génie Pharmaceutique", rapport de stage de fin d'études de DEA Automatique Industrielle de l'UCBL1, co-encadré par G. Degobert et P. Dufour (60%) OAI : dumas-00353848.
En 2010, Brahim Boussaoud était chef d'entreprise de la SARL actelec (Algérie)

SM2DEA01 printemps 1999 : Mohamed Larabi, "Contrôle expérimental du séchage de peinture", rapport de stage de fin d'études de DEA Automatique Industrielle de l'UCBL1, co-encadré par P. Laurent, D. Blanc, P. Dufour (60%) OAI : dumas-00353832
Cela a donné lieu à 1 communication publiée lors d'un congrès international avec comité de sélection et actes [CIACSAA03].
En 2010, Mohamed Larabi est maître de conférences à l'Université de Poitiers (IUT de Poitiers, département GEII).

2.9 Collaborations scientifiques

2.9.1 Interactions avec d'autres équipes

Je collabore (ou ai collaboré) avec divers chercheurs confirmés ou jeunes chercheurs, du niveau local au niveau international :

- AU LAGEP tout d'abord, avec les membres de mon équipe SNLEP et notamment : Hassan Hammouri et Madiha Nadri.

- AU LAGEP, avec des membres de l'équipe transferts couplés de matière et de chaleur : Pierre Laurent, Isabelle Bombard (doctorant) et Aurélie Hottot (doctorant).
- Avec l'ECUST (Chine), j'ai commencé une collaboration avec le Prof. Xing Gui Zhou, depuis août 2010.
- Avec IITB (Inde), j'ai re-commencé à collaborer avec Sharad Bhartiya, depuis le printemps 2010.
- Avec l'ENI de Tunis, j'ai commencé à collaborer avec Walid Labbane (doctorant co-tutelle), le Prof. N. Benhadj Braiek et A.S. Tlili, depuis le printemps 2010.
- Avec KUL (Belgique), j'ai collaboré avec Jeroen De Temmerman (doctorant) qui était encadré par Bart Nicolaï et Herman Ramon, en 2007 et 2008.
- Avec le LGPC (un de nos laboratoires voisins), j'ai collaboré avec David Edouard (doctorant) en 2002 et 2003.
- Avec l'Université of Delaware (USA), j'ai collaboré avec Sharad Bhartiya (post-doctorant), Prasad S. Dhurjati et Francis J. Doyle III lors de mon stage post-doctoral, en 2000 et 2001.
- Avec l'Université of Delaware (USA), avant mon post-doctorat, j'avais déjà collaboré avec Prasad S. Dhurjati et Dennis J. Michaud (doctorant) lors ma thèse, en 1998 et 1999.

2.9.2 Accueil de chercheurs

- Du 5 mai 2010 au 5 juin 2010 : Sharad Bhartiya, enseignant-chercheur à IIT Bombay (Inde), est venu travailler avec moi au LAGEP dans le cadre des mois invités de l'UCBL1.
- Du 5 avril au 3 mai 2010 : Walid Labbane, dans le cadre du début de sa thèse que je co-encadre en co-tutelle entre l'ENI Tunis (Tunisie) et l'UCBL1, est venu travailler avec moi au LAGEP.
- Entre janvier 2007 et octobre 2008 : Jeroen de Temmerman, dans le cadre de sa thèse à KUL (Belgique) que j'ai encadré (non officiellement), est venu travailler avec moi 3 fois au LAGEP.

2.9.3 Programmes d'échanges sortants

- Mai 2010 : j'ai été récipiendaire du programme Xu Guangqi, du Service pour la Science et la Technologie du Consulat Général de France à Shanghai (Chine). Cela concernait un appel à projet pour initier des collaborations avec des chercheurs français et des chercheurs de la région de Shanghai. Mon dossier a été sélectionné (dans les 23 retenus parmi 90) pour débuter une coopération avec le laboratoire SKLOCHE de l'ECUST.
  J'ai réalisé une 1ère visite en août 2010 qui a permis de cibler un problème de

conduite d'un procédé existant et qui commencera à être traité au printemps 2011 au LAGEP lors d'un stage de master recherche GSA. Le sujet est "Commande d'un procédé de déhydrogénisation du propane par catalyse", encadré par Hammouri, Zhou et Dufour.
Le référent à l'Ambassade est : Sylvain Joandel
sylvain.joandel@diplomatie.gouv.fr, et le dossier de subvention est référencé sous 209CHN0217

- Du 30 août au 3 septembre 2010 : j'ai été récipiendaire du programme "Asgard 2010" du service de Coopération Scientifique et Universitaire de l'Ambassade de France en Norvège.
  Cela concernait un appel à invitations de chercheurs français pour visiter des chercheurs et entreprises en Norvège. Mon dossier a été sélectionné (dans les 10 retenus parmi 30).
  Les référents à l'Ambassade sont : Julie SOUFFLARD jsoufflard@france.no, Jean Louis Duclos jluclos@france.no
- Du 14 au 18 septembre 2009 : j'ai été récipiendaire du programme "Vltava2009" du service de Coopération Scientifique et Universitaire de l'Ambassade de France de République Tchèque.
  Cela concernait un appel à invitations de chercheurs français en République tchèque, entre 2 et 5 jours, pour visiter des chercheurs et entreprises en République Tchèque. Mon dossier a été sélectionné (dans les 6 retenus parmi 50) pour un séjour de 5 jours pour des visites à l'ICPF (Académie des Sciences), l'ICTP et la société Unipetrol.
  Le référent à l'Ambassade est : Xavier Morise xavier.morise@diplomatie.gouv.fr
- Entre juin 2007 et octobre 2008 : j'ai réalisé 3 missions à KUL (Belgique) dans le cadre de l'encadrement (non officiel) de la thèse de Jeroen de Temmerman.

2.10 Animation scientifique

2.10.1 Relecture d'articles

- 2010 Journal : Drying Technology (DRT)
- 2010 Journal : Industrial & Engineering Chemistry Research (IECR)
- 2010 Journal : Biosystems Engineering
- 2010 Journal : 2 relectures pour IFAC-Journal of Process Control (JPC)
- 2010 Conférence : 49th IEEE Conference on Decision and Control (CDC), Atlanta, GA
- 2010 Conférence : 3 relectures pour 9th IFAC International Symposium on Dynamics and Control of Process Systems (DYCOPS), Leuven, Belgium
- 2009 Journal : Drying Technology (DRT)
- 2009 Journal : 2 relectures pour IEEE Transactions on Automatic Control (TAC)

- 2008 Conférence : 47th IEEE Conference on Decision and Control (CDC), Cancun, Mexico
- 2008 Journal : Industrial & Engineering Chemistry Research (IECR)
- 2007 Conférence : STIC et Environnement, Lyon, France
- 2006 Journal : Chemical Engineering Science (CES)
- 2005 Journal : Canadian Journal of Chemical Engineering (CJCE)
- 2005 Journal : Industrial & Engineering Chemistry Research (IECR)

2.10.2 Jury de thèse non co-encadrée

- 18 décembre 2008, Fabrice Babet : "Modélisation par équations aux dérivées partielles des retards pour la commande des systèmes robotiques télé-opérés", Institut PRISME, Université d'Orléans.

2.10.3 Jurys de thèses co-encadrées (officiellement ou non)

- 5 février 2010, Saida Flila : "Identification optimale et commande prédictive : application aux procédés", LAGEP, UCBL1.
- 5 décembre 2008, Bruno da Silva : "Contribution au contrôle de la distribution de la taille des particules lors d'un procédé de polymérisation en émulsion", LAGEP, UCBL1.
- 6 octobre 2008, Jeroen de Temmerman : "Development of a drying model for the moisture concentration in pasta with control design of the drying air properties", Katholieke Universiteit Leuven (KUL).

2.10.4 Organisation de manifestations scientifiques

- JDMACS-JNMACS 2005 (dans le cadre du GDR MACS), INSA de Lyon : webmestre de la partie scientifique du site web de la conférence nationale.
- JJC 2002, LAGEP : cela concernait 2 journées de présentations réalisées par les doctorants du LAGEP.
- Digester Workshop 2001, MD, USA : cela concernait 2 journées de présentations dans le cadre de mon stage de post-doctorat.

2.10.5 Participation à des GDR

Je participe (plus ou moins selon mes disponibilités) aux séminaires des :

- GDR MACS, GT "Commande prédictive non-linéaire"
- GDR MACS, GT "EDP- Théorie et applications de la commande des systèmes à paramètres répartis"

2.10.6 Participation à des réunions diverses

Je participe aux séminaires (1 par mois environ) de mon équipe de recherche SNLEP (qui comprend une dizaine de permanents et entre 5 et 10 jeunes chercheurs), avec parfois des présentations moins scientifiques mais en liaison avec la science. J'ai fait diverses présentations :

- 20 mai 2010 : "Loi de commande optimale pour l'estimation paramétrique"
- 27 mai 2009 : "Commande d'un procédé de cuisson de peinture en poudre : bilan"
- 13 février 2009 : "Archives libres et sites web professionnels (1/2) : enjeux et motivations"

2.10.7 Participation à des sociétés savantes

Je suis un des deux représentants du LAGEP auprès d'AXELERA (Chimie-environnement Lyon Rhône-Alpes), pôle de compétitivité à vocation mondiale.

2.11 Responsabilités collectives et administratives

Les listes sont données par ordre décroissant de date de prise de fonctions :

2.11.1 Recherche

- UFR (puis Département) GEP de mars 2009 jusqu'à aujourd'hui : correspondant UCBL1 du master recherche automatique (GSA) du master mention GEGP (mention co-habilitée avec l'ECLyon et l'INSA de Lyon). Ce parcours est suivi par 10 à 20 étudiants par an. Je serai le futur responsable du parcours dès septembre 2011
- UFR (puis Département) GEP depuis juillet 2007 jusqu'à la fin de cette commission en 2009 : membre élu à la commission recherche de l'UFR
- GDR MACS EDP en 2006 : responsable du GDR
- UFR GEP de septembre 1997 à septembre 1999 : membre doctorant élu à la commission recherche de l'UFR
- Laboratoire LAGEP de septembre 1997 à septembre 1999 : membre doctorant élu au conseil de laboratoire

2.11.2 Enseignement

- UFR (puis Département) GEP de mars 2009 jusqu'à aujourd'hui : correspondant UCBL1 du master recherche automatique (M2RGSA) du master mention GEGP (mention co-habilitée avec l'EClyon et l'INSA de Lyon)

- UFR (puis Département) GEP du 1er janvier 2007 jusqu'à 28 janvier 2010 : responsable de la communication (coordination d'actions, affiches, webmaster, listmaster)
- UFR GEP du 1er janvier 2007 au 1er octobre 2008 : président de la commission formation de l'UFR (2 mentions de master, 1 mention de licence, 1 licence professionnelle, 40 enseignants chercheurs, 200 intervenants, 400-500 étudiants dans des domaines professionnels de l'EEA/GBM/GP)
- Baccalauréat : président de jury en 2004, 2006
- UFR GEP de juillet 2003 à janvier 2007 : membre de droit à la commission formation de l'UFR
- UFR (puis Département) GEP de juillet 2003 jusqu'à aujourd'hui : responsable de 3 UEs d'automatique et d'informatique industrielle en L2, L3 et M1
- UFR GEP de juillet 2003 à septembre 2007 (date de fin des DEUST hors STAPS) : responsable de 10 UEs (d'automatique, d'informatique industrielle, formation générale) du DEUST MIALI
- UFR GEP de juillet 2003 à septembre 2007 (date de fin des DEUST hors STAPS) : responsable de formation professionnelle DEUST MIALI (2 années de formation), et coordonnateur de la 2nde année
- UFR (puis Département) GEP de juillet 2003 jusqu'à aujourd'hui : responsable pédagogique de la salle tp d'automatique de l'UFR (Master, Licence Pro, Licence STS) qui comprend 6 automates et procédés en réseau, avec divers logiciels scientifiques et industriels.

2.11.3 Autres

- Equipe de recherche SNLEP depuis le printemps 2010 : je soutiens Vincent Andrieu dans la tâche de Webmestre du site web de l'équipe : www.tinyurl.com/SNLEP
- UFR GEP du 1er janvier 2007 au 1er octobre 2008 : membre invité au conseil d'UFR
- UCBL1 de décembre 2002 à novembre 2006 : membre élu aux relations internationales de l'Université
- UCBL1 de décembre 2002 à novembre 2006 : membre élu au conseil d'administration de l'Université
- UCBL1 de 2003 à août 2008 (date de fin des CSES) : membre élu de la CSES 61 de l'Université
- ECLyon en 2004 : membre nommé de la CSES 27-61-63 à l'École Centrale Lyon
- University of Delaware de juillet 2000 à juillet 2001 : webmestre du site du projet du stage postdoctoral (6 partenaires académiques et industriels)

2.12 Activités d'enseignement et de formation

2.12.1 Service statutaire

J'enseigne dans les formations professionnalisantes de l'UCBL1 suivantes : Licence Professionnelle Automatique et Informatique Industrielle, Licence Génie Électrique et Génie des Procédés (L2 et L3), Master Génie Électrique et Génie des Procédés (M1). Les publics sont principalement issus de l'EEA, mais aussi de Génie des Procédés, voire de Génie des Procédés Alimentaires.
J'enseigne chaque année pour 192h équivalent TD (dont environ 40% en CM, 15% en TD, 30% en TP et 15% en projets). Cela concerne les disciplines suivantes : automatique des systèmes continus, automatique des systèmes à évènements discrets (logique), commande et supervision, langage C, avec le plus souvent utilisation de diverses maquettes en réseau avec automates Schneider. Au niveau logiciel, j'utilise Unity Pro, PL7 Pro, Matlab, Simulink et Monitor Pro.

2.12.2 Mise en place de nouveaux enseignements

Je remets à jour régulièrement le contenu de mes enseignements, notamment grâce au retour d'informations données dans les évaluations et pendant les enseignements.

En tant que responsable pédagogique de la salle de TP d'automatique de Master, je suis responsable de l'achat du matériel, de la mise en route et de l'entretien de la plupart des maquettes et des documents et logiciels utilisables. En relation avec des collègues de l'équipe pédagogique d'automatique, je suis en charge de répondre régulièrement à des appels internes à projets pour financer l'achat de matériels. A ce jour, nous avons 3 procédés continus et 3 procédés discrets, commandés en réseau ethernet par automates.

2.12.3 Production de documents pédagogiques

Dans les 3 UEs principales où j'interviens, les documents de TD/TP, annales, liens web sont disponibles sous l'intranet pédagogique de l'UCBL1. Pour 2 UEs, le cours est en plus disponible sous forme de fichiers de présentation. Cela permet donc à mes étudiants de disposer de ces éléments à volonté à tout moment. Cela me permet aussi de me focaliser sur l'essentiel en cours, et d'aborder rapidement des cas concrets. Par ailleurs, via ma responsabilité de salle de TP d'automatique de master, je produis régulièrement des documents et applications utilisables par les enseignants et étudiants en TP.

2.12.4 Encadrement de projets

Les projets internes des étudiants sont souvent pour moi l'occasion d'une part de confronter les étudiants à des cas concrets, et d'autre part de leur demander de

réaliser soit une étude en salle de TP (qui peut me servir par la suite pour l'évolution des TPs) soit des expériences de recherche :

- Dans le cadre de la Maîtrise/Master 1ère année en EEA (option automatique), des projets se déroulent en interne à l'université entre mars et juin dans le cadre de l'UE TER (Travaux d'Etudes et de Recherche). J'en encadre 1 à 2 par an depuis mon arrivée.
- Dans le cadre de la Licence Professionnelle AII (Automatique et Informatique Industrielle), formation ouverte en 2006/2007, ces projets tutorés se déroulent en interne à l'université entre octobre et mars dans le cadre d'une UE. J'en encadre 1 à 2 par an depuis 2007.

2.12.5 Encadrement de stages

J'encadre des étudiants lors de leur stage de fin d'études de niveaux :

- DEA/Master 2nde année Recherche option automatique : 1 étudiant environ par année.
- DESS/Master 2nde année Professionnelle option automatique : 2 à 3 étudiants environ par année.
- DEUST MIALI/Licence Professionnelle AII : 2 à 3 étudiants environ par année. J'assurais le suivi de certains stages et l'organisation du jury de tous les stages.
- Je participe bien entendu aussi à des jurys de stage d'autres étudiants de ces formations.

2.12.6 Formation continue de personnels industriels

- En 2005/2006 et 2006/2007, j'ai monté et assuré 2 formations intensives (l'équivalent d'1 jour sur les 3 jours de la formation) dans le cadre de l'automatique en génie électrique. Cela a donc concerné la rédaction d'un support de cours avec fichiers tutoriels sur Matlab/Simulink.

2.12.7 Formation continue de nouveaux enseignants-chercheurs

- 17 janvier 2008 : lors des stages de formation des nouveaux enseignants chercheurs à l'UCBL1, j'ai assuré une présentation orale : "Utilisation de SPIRAL comme outil de gestion à l'UFR GEP".

2.12.8 Formation initiale en dehors de l'établissement

- Décembre 2002 : Mission de 15 jours au Tchad, à l'IUST d'Abéché, pour des enseignements d'automatisme.

Chapitre 3

Introduction à mes activités de recherche

Sommaire

3.1 Contexte de mes activités de recherche 29
3.2 Stratégie personnelle de recherche 30

3.1 Contexte de mes activités de recherche

Afin de pouvoir comprendre certaines de mes orientations de recherche en automatique, il convient tout d'abord de situer le milieu où je travaille. Depuis ma nomination au poste de Maître de Conférences en 2001, j'effectue mes travaux de recherche au LAGEP (Laboratoire d'Automatique et de Génie des Procédés), UMR 5007 UCBL1-CNRS. Le LAGEP a été créé en 1988 et ses chercheurs ont pour objectif d'y développer des recherches pluridisciplinaires en automatique et en génie des procédés.
Le LAGEP est composé de 36 enseignants-chercheurs ou chercheurs permanents, d'une quarantaine de jeunes enseignants-chercheurs ou chercheurs non permanents et de 6 ITA/IATOS. Du fait de cet aspect pluridisciplinaire recherché, les personnels couvrent plusieurs sections du CNU (61, 62 et 85), et aussi plusieurs sections du CNRS (7, 10 et 14). Concrètement, se côtoient au LAGEP : des mathématiciens, des automaticiens (dans le sens français qu'ils sont de formation EEA : j'en fais partie), des spécialistes en génie des procédés, et depuis une dizaine d'années, des pharmaciens et quelques chimistes.
Au LAGEP, sont donc développés des travaux pluridisciplinaires en recherche théorique et appliquée, dans les domaines de l'automatique, du génie des procédés, et de la pharmacotechnie. Plus précisément, ces travaux sont liés à l'élaboration du solide, aux transferts et réactions en physico-chimie et en sciences du vivant, et, pour ce qui concerne l'automatique : à la modélisation, à l'identification, à la simulation numérique et à la commande de procédés (au sens de l'observation, du diagnostic et de la conduite). La recherche au LAGEP est autant académique que fortement

liée au milieu industriel. Un des challenges du LAGEP est donc de faire en sorte qu'une symbiose puisse s'établir entre ses communautés couvrant un spectre assez large, afin que des travaux communs puissent en ressortir.
Je travaille dans le domaine de la commande automatique. Par commande, on entend ici des méthodes où les entrées (variables manipulées) d'un procédé sont ajustées en ligne (pendant l'exploitation) par une loi de commande appropriée, de telle façon que les sorties (variables commandées/contrôlées) suivent les besoins de production spécifiés (objectif de commande). La loi de commande est basée ici sur un modèle de commande qui décrit la relation entre les entrées manipulées (puissance de chauffe, débit, ...) et les sorties à commander(température de sortie, débit, degré d'avancement, ...) via l'évolution dynamique des variables d'état (représentatifs de l'évolution des phénomènes interne au procédé) à travers un modèle choisi (des équations utilisant des principes fondamentaux et/ou des parties "boîte noire"), comportant des paramètres (dont les valeurs sont plus ou moins bien connues). Si aucune mesure en ligne n'est possible, on utilise une approche de commande en boucle ouverte. Mais avec des mesures disponibles en ligne, de meilleurs résultats sont possibles via une commande en boucle fermée. C'est ce second principe que j'utilise. Ces mesures peuvent aussi servir à en estimer d'autres en ligne via un capteur logiciel basé sur le modèle (observateur). Enfin, au LAGEP, on se retrouve la plupart du temps à manipuler des modèles de connaissances basés sur des équations aux dérivées partielles, non linéaires, parfois avec frontière variable.

3.2 Stratégie personnelle de recherche

Nous venons de voir qu'au LAGEP, se regroupent des enseignants-chercheurs et des chercheurs couvrant un spectre assez large de thématiques scientifiques. Concernant les automaticiens, à mon sens, cette diversité des champs d'application doit aussi être vue comme une chance de pouvoir être confrontés à des problèmes réels, afin de susciter auprès de nous de nouvelles interrogations auxquelles nous cherchons à formuler des réponses.
Ma recherche est ainsi fortement motivée par des problèmes réels issus du génie des procédés, notamment dans des applications liées à des transferts de matière et de chaleur, à travers des projets nécessitant donc une approche pluridisciplinaire. Ainsi, depuis ma thèse, j'ai pu travailler sur divers procédés : séchage de peinture, cuisson de polymère, dépollution de gaz par réaction catalytique, réacteur de polymérisation, cuisson de peinture, séchage de pâtes alimentaires et lyophilisation de produits pharmaceutiques.
A partir des problèmes rencontrés, ma stratégie est de contribuer à travailler à l'amélioration et à l'optimisation des performances de ces procédés vus comme des systèmes continus, via des approches automatiques en boucle fermée. Ma vision de la recherche passe donc par plusieurs étapes :

1. Analyse d'un problème concret : le but est, à partir d'un procédé réel, de formuler des problèmes plus génériques faisant appel à l'automatique, et de

formuler, autant que possible, de nouveaux problèmes nécessitant la réflexion sur la création de nouveaux outils pour l'automaticien.

2. Développement d'outils théoriques pour l'automatique :
   - Historiquement, mon premier axe soutient l'idée de formuler un problème de conduite d'un procédé, où l'on cherche à obtenir un produit final avec certaines propriétés souhaitées, en un problème de conduite en ligne à résoudre pendant l'exploitation. Cela se traduit alors en problème d'optimisation (poursuite de trajectoire, optimisation de vitesse, ...) avec prise en compte de diverses contraintes (sur l'entrée, la sortie). La stratégie de commande prédictive basée sur un modèle est utilisée dans mes travaux.
   - Plus récemment, j'ai créé mon second axe de recherche se situant à la frontière entre le design d'expériences optimales et l'identification en ligne de paramètres, le tout basé sur des outils de l'automatique. En effet, dans les modèles d'état, on peut se retrouver avec des phénomènes dont la modélisation est soit assez incomplète, soit trop détaillée pour pouvoir identifier tous les paramètres correctement. Dans ce cas, ces incertitudes paramétriques peuvent avoir par la suite un impact non négligeable sur les performances de la conduite en ligne. Depuis quelques années, je m'intéresse donc aussi au problème d'identification en ligne de paramètres du modèle, via une approche couplant commande prédictive et observateur. Les perspectives sont là assez vastes, et c'est principalement dans cet axe (assez original il me semble) que mes activités à court et moyen termes se situent.
3. Développement de logiciels liés à l'automatisation : à mon sens, le développement d'outils théoriques pour l'automatique a forcément besoin d'être validé au moins en simulation, voire en expérimentation si possible. A travers mes 2 axes de recherche, je développe donc aussi des logiciels (MPC@CB, ODOE4OPE), afin qu'ils puissent d'abord être utilisés par des tiers et d'aboutir ensuite à des versions largement utilisables et valorisables.
4. Validation (en simulation et/ou en expérimentation) des approches d'automatique : l'objectif final est de montrer que mes approches peuvent être appliquées sur des procédés réels afin d'en améliorer les performances (qualité du produit final, consommation d'énergie, etc.). Après les validations en simulation, quand cela est possible, je procède à des tests de validation sur procédé réel.

Dans ce qui suit, nous allons voir plus en détails ma vision personnelle de la recherche via la synthèse de mes travaux de recherche, notamment liés à des encadrements de jeunes chercheurs (de niveaux postdoctoral, doctoral, et master recherche), à des contrats de recherche et à des collaborations scientifiques aux niveaux national et international, et ce depuis ma nomination au poste de maître de conférences en 2001.

Chapitre 4

Axe de recherche : commande prédictive

Sommaire

4.1 Aspects théoriques 35
4.1.1 Introduction 35
4.1.2 Contexte et problématiques 35
4.1.3 Formulation utilisée 37
4.2 Encadrement de jeunes chercheurs : bilan 43
4.3 Thèse (IFP, LGPC, LAGEP) d'Edouard : procédé de dépollution d'air par catalyse 44
4.3.1 Introduction 44
4.3.2 Commande : objectifs et modèle 45
4.3.3 Commande : résultats 50
4.3.4 Conclusion 52
4.4 Thèse (LAGEP) de Da Silva : procédé de polymérisation en émulsion 54
4.4.1 Introduction 54
4.4.2 Commande : objectifs et modèle 54
4.4.3 Commande : résultats 57
4.4.4 Conclusion 62
4.5 Thèse (ADEME, EDF, Dupont, Philipps, LAGEP) de Bombard : procédé de cuisson de peintures en poudre . 63
4.5.1 Introduction 63
4.5.2 Commande : objectifs et modèle 64
4.5.3 Commande : résultats 68
4.5.4 Conclusion 72
4.6 Post-doctorat (AUF, LAGEP) de Daraoui : procédé de lyophilisation de produits pharmaceutiques 72
4.6.1 Introduction 72
4.6.2 Commande : objectifs et modèle 73

4.6.3 Commande : résultats 76
4.6.4 Conclusion 78
4.7 Thèse (Soubry, KUL (Belgique)) de De Temmerman : procédé de séchage de pâtes alimentaires 80
4.7.1 Introduction 80
4.7.2 Commande : objectifs et modèle 80
4.7.3 Commande : résultats 82
4.7.4 Conclusion 82
4.8 Développement d'un logiciel : MPC@CB 84
4.9 Publications personnelles dans cet axe 85

4.1 Aspects théoriques

4.1.1 Introduction

Au LAGEP, la recherche pluridisciplinaire mène assez souvent à travailler sur des modèles continus dynamiques décrits par des équations aux dérivées partielles (appelés aussi systèmes à paramètres répartis), par exemple un système où il y a des échanges de chaleur et/ou de matière d'une façon répartie dans l'espace. Deux approches peuvent être utilisées pour la commande et la supervision d'un procédé en utilisant ce type de modèle :

- Soit utiliser un modèle moins fin basé sur des bilans plus grossiers et globaux qui mène à des équations différentielles ordinaires couplées à des conditions initiales (du temps). On ne maitrise pas le phénomène local et réparti, mais son utilisation pour la commande peut donner de bons résultats au niveau des sorties à piloter. Un des avantages est que la théorie de ces systèmes est très largement étudiée et répandue, y compris en milieu industriel.
- Soit garder ce type de modèle, plus fin, et basé sur des équations aux dérivées partielles couplées à des conditions initiales (du temps) et à des conditions aux limites (spatiales). L'élaboration de la commande tient compte des phénomènes locaux et répartis, mais sa mise en oeuvre est généralement compliquée à valider. Ces modèles (dits en dimension infinie) sont mathématiquement plus difficiles à manipuler et à étudier que les systèmes décrits par des équations différentielles ordinaires (dits en dimension finie).

Si l'on souhaite améliorer le pilotage de certains de ces procédés, en ligne et par calculateur numérique, l'utilisation d'une loi de commande basée sur son modèle décrit par des équations aux dérivées partielles peut être une solution. Dans ce cas, il convient donc à un moment ou à un autre de passer de la dimension infinie (caractéristique du modèle) à la dimension finie (caractéristique d'un calculateur numérique).

Dans cette partie théorique, nous allons voir comment cela s'applique sur la stratégie de commande prédictive que j'ai développée et que j'ai utilisée sur divers procédés.

4.1.2 Contexte et problématiques

Je vais m'intéresser ici à rappeler des problématiques liées à une structure de commande possible pour des procédés (stables en boucle ouverte) dont le modèle (continu et dynamique) est décrit par des équations aux dérivées partielles à une variable d'espace. Pour ces procédés, je m'intéresse à réaliser la commande (pilotage) en ligne, tout en tenant compte de divers besoins :

- la conduite doit se faire dans un mode optimal (dans le sens d'un critère qui doit bien sûr être défini initialement) : par exemple, une des sorties doit suivre au mieux une trajectoire pré-définie ; ou alors, le temps opératoire doit être minimisé.
- un certain nombre de contraintes d'exploitation prédéfinies doit être pris en compte : les commandes appliquées sont limitées en amplitude (voire en vi-

tesse), et les sorties (mesurées ou estimées) doivent rester dans une zone opératoire (dûe à la production, à la sécurité).
- la loi de commande doit pouvoir être implantée expérimentalement "en temps réel"[1] : les systèmes étudiés ici ont en général une période d'échantillonnage de l'ordre de la seconde à quelques secondes.
- la loi de commande doit être robuste vis à vis des incertitudes : la valeur des paramètres (des constantes) du modèle est parfois connu avec une large incertitude, et certains paramètres temps variant (perturbations) ne sont pas toujours mesurés en ligne (ou sont connus avec une incertitude) et peuvent avoir un large impact sur certaines sorties.

En automatique des systèmes continus, si on regarde les travaux traitant des divers domaines d'étude classique (identification, observation, diagnostic, commande, ...) et basés sur un modèle dynamique, la grande majorité utilise des modèles décrits par des équations différentielles ordinaires : une minorité relative de travaux est donc directement basée sur des modèles décrits par des équations aux dérivées partielles. Structurellement, la différence est que les modèles décrits par des équations aux dérivées partielles utilisent explicitement des éléments différentiels de l'état par rapport aux variables d'espace considérées. Si ces modèles aux équations aux dérivées partielles ont l'avantage d'être plus précis en termes de modélisation, ils sont parmi les plus complexes à manipuler car ils présentent de nombreux inconvénients :

- Très fondamentalement, par exemple, certains travaux s'intéressent uniquement, et en restant dans le cadre infini, à étudier les conditions d'existence et d'unicité de la solution à ces équations [5] où à l'existence d'une commande stabilisante [3] . Les développements mathématiques sont assez complexes et ne tiennent pas compte des contraintes en temps réel sur la commande et la sortie du procédé, ce qui freine leur large utilisation en ingénierie. Ces résultats ont néanmoins leur importance si l'on cherche à utiliser un telle structure de modèle dans une loi de commande, notamment en recherchant une solution.
- Même s'il y en a bien moins qu'en dimension finie, de nombreux travaux de commande existent en dimension infinie [7]. Cependant, il n'y a pas d'approche globale permettant de couvrir les divers types de modèle et de non linéarités, tels par exemple ceux parfois assez particuliers que nous verrons par la suite dans ce mémoire.
- Ces modèles peuvent présenter des variables de commande, soit explicitement à l'intérieur du domaine Ω des variables d'espace, soit explicitement à leur frontière $\partial\Omega$ (assez couramment), soit les deux (ce qui est plus rare). En général, les commandes sur de tels procédés sont en nombre restreint et localisées alors que leurs effets sont bien répartis.
- On connait déjà les problèmes d'observation en dimension finie, dû au fait que l'état entier peut ne pas être toujours entièrement réellement mesuré. En dimension infinie, cette question paraît encore bien plus importante : on a en effet du mal à imaginer la présence d'un nombre infini de capteurs sur un procédé réel. En général, même si on est capable de modéliser assez finement

1. Ceci est différent de la notion stricte de temps réel connue en informatique.

le comportement du procédé par des équation aux dérivées partielles, pour la commande en ligne, on est souvent confronté pour ce type de procédé au manque de mesures disponibles en ligne (i.e. en temps réel).

- Pour ces systèmes, la synthèse d'un correcteur que l'on peut programmer sur calculateur numérique nécessite donc une formulation en dimension finie. Pour ce faire, il y a 2 approches :
  1. Continuer à utiliser le modèle de dimension infinie pour synthétiser la loi de commande. Enfin, réaliser une approximation de ce correcteur en dimension finie et le mettre en oeuvre dans le calculateur numérique. Cependant, les résultats numériques peuvent n'avoir qu'une faible utilité pour l'analyse du contrôle du procédé réel [M01] [2] .
  2. Réaliser une approximation de la solution du modèle ou de la structure du modèle de dimension infinie en dimension finie, puis synthétiser un correcteur en dimension finie que l'on peut programmer directement dans le calculateur numérique.
- On voit donc qu'il est nécessaire, pour mettre numériquement en oeuvre une loi de commande, de passer à un moment de la dimension infinie à la dimension finie. Pour ce faire, étant donné en général le caractère complexe et non linéaire des modèles d'intérêt dans nos travaux, des méthodes analytiques ne peuvent être employées. Méthodologiquement, il y a 2 approches [31] :
  1. A partir de la structure du modèle donné en dimension finie, on réalise une approximation des équations. Les opérateurs différentiels de l'espace sont approchés en dimension finie : par exemple, en différences finies, $\frac{\partial x}{\partial z}_{z=z_i} = \frac{\delta x}{\delta z_i}$ avec δx la différence de quantité x entre 2 points consécutifs distants de $\delta z_i = z_{i+1} - z_i$. Cette méthode des différences finies est simple à mettre en oeuvre, mais peut nécessiter un nombre de points élevé.
  2. La 2nde approche consiste à exprimer initialement la forme de la solution recherchée sur un nombre fini de positions via des polynômes. On parle alors d'approximation de solutions. On y trouve par exemple la méthode des collocations orthogonales, mais la structure (et donc les propriétés) du modèle y est perdue.

  Diverses questions se posent sur le choix de l'une ou l'autre de ces 2 approches en tant que méthode numérique, notamment ici en termes de : taille de l'état approché en dimension finie, impact des pertes d'informations (y compris structurelles) sur l'erreur de modélisation, temps de calcul nécessaire pour la résolution du modèle dans la loi de commande.

4.1.3 Formulation utilisée

Dans cette partie, nous allons rappeler la formulation de commande prédictive issue de ma thèse de doctorat [M02] [3] . C'est une loi de commande prédictive,

2. Publication personnelle : référence complète dans la partie CV (2.7).
3. Publication personnelle : référence complète dans la partie CV (2.7).

utilisable en ligne et en boucle fermée, basée sur le modèle initialement formulé sous forme d'équations aux dérivées partielles non linéaires. Afin de prendre en compte des divers besoins de commande formulés dans la partie précédente, plusieurs étapes ont été nécessaires avant de formuler le problème final de commande prédictive.

4.1.3.1 Formulation initiale du problème de commande prédictive

La commande prédictive concernait en 2003 plus de 4000 applications au total dans le monde, sans rajouter les solutions locales développées en interne des entreprises [33]. Cette grande popularité vient notamment du fait que le principe est assez simple à mettre en oeuvre sur un calculateur : la commande prédictive a pour idée d'insérer dans la boucle de retour un élément prédictif basé sur le modèle. Pour la résolution, ceci nécessite un schéma de discrétisation temporel (et spatial si le modèle est à base d'équations aux dérivées partielles). Le calculateur détermine alors, via l'optimisation sous contraintes d'un critère J (représentant en général une somme dans le futur de normes, via une forme quadratique) sur l'horizon de prédiction N_p, à l'instant d'échantillonnage présent k, l'argument d'optimisation $\tilde{u}$ lié à la commande. A la période d'échantillonnage suivante, la commande issue de cette séquence est réellement appliquée au procédé, les mesures du procédé y_p sont mises à jour et la procédure ci-dessus est répétée. Comme le problème de commande est résolu par un calculateur numérique, on considère donc ici les signaux des modèles continus à des instants discrets : à l'instant présent (resp. futur) de l'indice de temps discrétisé k (resp. j), où le temps continu $t = k * T_e$ (resp. $t = j * T_e$) et où T_e est la période d'échantillonnage. Le problème d'optimisation à résoudre est élaboré comme suit :

$$\begin{cases} \min\limits_{\tilde{u}} J(\tilde{u}) = J\left(y_p(j), u(j)\right) = \sum\limits_{j=k+1}^{k+N_p} F\left(y_p(j), u(j)\right) \\ u(j) = f_u(\tilde{u}, j, k) \ \forall\, k > 0, \quad \forall\, j \in [k+1, k+N_p] \\ u(.) \in U \subset \mathbb{R}^m \\ c_i\left(y_p(k), u(j)\right) \leq 0 \ \forall\, k > 0, \quad \forall\, j \in [k+1, k+N_p], \quad \forall\, i \in [1, n_c] \end{cases} \tag{4.1}$$

où F représente l'objectif de commande, $\tilde{u}$ est l'argument d'optimisation lié aux commandes u (contraintes en amplitude, voire aussi en vitesse) et il y a n_c contraintes c_i à vérifier sur les sorties (supposées mesurées ou estimées en ligne) $y_p \in \mathbb{R}^p$ du procédé. On peut aussi paramétrer cette commande recherchée via un horizon de commande N_c (mais cette technique n'est pas utilisée ici) :

$$\begin{cases} u(j) = f_u(\tilde{u}, j, k) \ \forall\, k > 0, \quad \forall\, j \in [k+1, k+N_c] \\ u(j) = u(k+N_c) \text{ sinon} \end{cases} \tag{4.2}$$

4.1.3.2 Paramétrisation de l'argument de commande

Comme on cherche à résoudre numériquement ce problème, il faut tout d'abord que l'argument d'optimisation $\tilde{u}$ soit en dimension finie. Cela revient donc à réaliser

une approximation de $\tilde{u}$ via une paramétrisation. Cela peut se faire de plusieurs façons.

- La plus simple est de décider que l'on recherche, à chaque instant k, pour chaque composante du vecteur de commande u, un échelon. On a alors un seul argument d'optimisation par commande. Cela doit permettre a priori de diminuer le temps de calcul, mais cela implique une perte de flexibilité dans la recherche de la solution.
- Plus généralement, on peut décider que chaque composante du vecteur de commande u est une fonction de plusieurs paramètres. Par exemple, en prenant un horizon de commande N_c, on peut rechercher pour chaque composante de u N_c échelons différents sur l'horizon de prédiction. Cela permet de se rapprocher de la formulation initiale, au détriment cependant du temps de calcul.

Comme souligné précédemment, le temps de calcul peut être critique dans nos applications. Par conséquent, on choisit la 1ère paramétrisation. Le problème d'optimisation sous contraintes d'entrée/sortie (4.1) est donc reformulé comme suit :

$$\begin{cases} \min\limits_{u(k)} J(u(k)) = J\left(y_p(j), u(j)\right) \\ u(j) = u(k) \ \forall\, k > 0, \quad \forall\, j \in [k+1, k+N_p] \\ u(k) \in U \subset \mathbb{R}^m \\ c_i\left(y_p(k), u(j)\right) \leq 0 \ \forall\, k > 0, \quad \forall\, j \in [k+1, k+N_p], \quad \forall\, i \in [1, n_c] \end{cases} \tag{4.3}$$

4.1.3.3 Utilisation du principe de modèle interne

Le problème principal de cette formulation (4.3) est que, à l'instant présent k, elle est basée sur des signaux dans le futur j : les mesures du procédé y_p. Malheureusement, ces futures valeurs ne sont pas disponibles à l'instant présent k, alors que la mesure du procédé y_p est la seule valeur disponible à l'instant k. Afin d'obtenir un problème d'optimisation qui peut être résolu, l'idée est d'approcher ces signaux en utilisant les mesures à l'instant k et l'intégration du modèle du procédé dans une structure de commande par modèle interne (où l'entrée u est donc appliquée en parallèle sur le procédé et sur le modèle choisi). Soit (S_{NL}), le modèle considéré décrit par un système d'équations aux dérivées partielles non linéaires, à commandes frontières et/ou réparties :

$$(S_{NL}) \begin{cases} \dfrac{\partial x_m}{\partial t}(z,t) = f_d(x_m(z,t), u(t)) \ \forall z \in \Omega, \quad t > 0 \\ f_f(x_m(z,t), u(t)) = 0 \ \forall z \in \partial\Omega, \quad t > 0 \\ y_m(t) = h(x_m(z,t), u(t)) \ \forall z \in \Omega \cup \partial\Omega, \quad t > 0 \\ x_m(z,t) = x_{m_i} \ \forall z \in \Omega \cup \partial\Omega, \quad t = 0 \end{cases} \tag{4.4}$$

où z est la variable indépendante d'espace variant dans le domaine Ω de frontière Ω, t est la variable indépendante du temps (continu). x_m qui est dans un espace de dimension infinie, $u \in \mathbb{R}^m$ et $y_m \in \mathbb{R}^p$ sont respectivement les vecteurs d'état, de

commande et de sortie du modèle. Les opérateurs sont : f_d dans le domaine, f_f à la frontière, h pour la sortie. La structure de commande par modèle interne permet d'écrire :

$$e_y(k) = y_p(k) - y_m(k) \tag{4.5}$$

L'erreur $e_y(k)$ étant supposée constante sur l'horizon de prédiction (mais mise à jour à chaque k via les mesures $y_p(k)$), la relation suivante permet d'approcher les signaux nécessaires dans (4.3) aux instants futurs j grâce à la sortie solution du modèle (4.4) :

$$y_p(j) = y_m(j) + e_y(k) \tag{4.6}$$

Ainsi, cela permet de formuler un problème d'optimisation sous contraintes d'entrée/sortie basé sur le modèle (et donc désormais soluble) :

$$\begin{cases} \min\limits_{u(k)} J(u(k)) = J\left(y_m(j), e_y(k), u(j)\right) \\ u(j) = u(k) \;\forall\, k > 0, \quad \forall\, j \in [k+1, k+N_p] \\ u(k) \in U \subset \mathbb{R}^m \\ c_i\left(y_m(j), e_y(k), u(j)\right) \leq 0 \;\forall\, k > 0, \quad \forall\, j \in [k+1, k+N_p], \quad \forall\, i \in [1, n_c] \\ \\ \text{basé sur la résolution en ligne du modèle de prédiction } S_{NL}(4.4). \end{cases} \tag{4.7}$$

4.1.3.4 Prise en compte des contraintes d'entrée

Les commandes u issues du problème d'optimisation doivent être à chaque instant k applicables. En outre, comme la recherche de la solution au problème (4.6) prend a priori un temps inconnu, l'algorithme de commande doit garantir, à chaque instant de son calcul, que la meilleure solution actuelle u au problème d'optimisation satisfait toutes les contraintes d'entrées. Par conséquent, on emploie une méthode de transformation du vecteur u, contraint, en un vecteur p, non contraint. Il existe de nombreuses transformations possibles [30]. Parmi celles-ci, nous avons retenu une loi de transformation hyperbolique :

$$u(k) = g(p(k)) = g_{moy}(k) + g_{amp}(k) \tanh\left[\frac{p(k) - g_{moy}(k)}{g_{amp}(k)}\right] \tag{4.8}$$

où g_{moy} et g_{amp} sont des vecteurs temps variants, mis à jour à chaque k en fonction des bornes sur les contraintes d'amplitude et de vitesse de la commande, et de la commande $u(k-1)$. Cette transformation g présente l'avantage d'être univoque et est en plus paramétrée de telle façon que quand $p(k) \to u(k-1)$, alors l'approximation de g autour de ce point est linéaire [M02] [4] . Ainsi, si une commande variant peu doit être trouvée, la non linéarité introduite par cette transformation est faible. L'inconvénient est, qu'aux limites, il y a une perte de sensibilité : $p(k)$ peut varier dans l'algorithme de recherche, alors que $u(k)$ ne varie presque pas. Cela peut donc

4. Publication personnelle : référence complète dans la partie CV (2.7).

avoir son impact sur le temps de calcul. Ainsi, cela permet de formuler un problème d'optimisation sous contraintes de sortie basé sur le modèle :

$$\begin{cases} \min\limits_{p(k)} J(p(k)) = J\left(y_m(j), e_y(k), u(j)\right) \\ u(j) = u(k) = g(p(k)) \ \forall\, k > 0, \quad \forall\, j \in [k+1, k+N_p] \\ c_i\left(y_m(j), e_y(k), u(j)\right) \leq 0 \ \forall\, k > 0, \quad \forall\, j \in [k+1, k+N_p], \quad \forall\, i \in [1, n_c] \\ \\ \text{basé sur la résolution en ligne du modèle de prédiction } S_{NL}(4.4). \end{cases} \tag{4.9}$$

4.1.3.5 Prise en compte des contraintes de sortie

En ce qui concerne les contraintes c_i sur les sorties, il faut prendre en compte le fait que parfois, il peut ne pas y avoir toujours de solution au problème contraint, par exemple du fait du large impact des perturbations non mesurées sur les sorties contraintes [ARIACL05] [5] . En outre, on cherche à continuer à formuler un problème d'optimisation avec le moins d'arguments d'optimisation possible (afin de limiter le temps de calcul). Nous avons donc retenu la méthode des pénalités externes [13] où l'idée est de pénaliser la fonction coût à minimiser J par une forme quadratique définie positive J_{ext} afin de formuler une nouvelle fonction coût total J_{tot} :

$$\begin{cases} \min\limits_{p(k)} J_{tot}(p(k)) = J(p(k)) + J_{ext}(p(k)) \\ J_{ext}(p(k)) = \displaystyle\sum_{j=k+1}^{k+N_p} \left(\sum_{i=1}^{i=n_c} \omega_i \left[\max\left(0, c_i\left(y_m(j), e_y(k), u(j)\right)\right)\right]^2 \right) \\ u(j) = u(k) = g(p(k)) \ \forall\, k > 0, \quad \forall\, j \in [k+1, k+N_p] \end{cases} \tag{4.10}$$

où les poids positifs w_i évoluent au cours de la recherche de la solution à k. Si toutes les contraintes sortie sont satisfaites, alors la pénalité est nulle. Toute contrainte sortie non vérifiée tend à pénaliser la minimisation de J, ce qui doit forcer l'algorithme à satisfaire toutes les contraintes sorties.
Ainsi, le problème d'optimisation est reformulé à nouveau : il s'agit d'un problème d'optimisation pénalisé sans contrainte basé sur le modèle :

$$\begin{cases} \min\limits_{p(k)} J(p(k)) = J\left(y_m(j), e_y(k), u(j)\right) + J_{ext}\left(y_m(j), e_y(k), u(j)\right) \\ u(j) = u(k) = g(p(k)) \ \forall\, k > 0, \quad \forall\, j \in [k+1, k+N_p] \\ \text{basé sur la résolution en ligne du modèle de prédiction } S_{NL}(4.4). \end{cases} \tag{4.11}$$

4.1.3.6 Linéarisation et calculs hors ligne

Avant de passer à une méthode de résolution numérique du problème, il convient de contribuer une nouvelle fois à diminuer le temps de calcul en ligne. Pour cela, la solution du système non linéaire (S_{NL}) est approchée en deux étapes :

5. Publication personnelle : référence complète dans la partie CV (2.7).

- par la détermination **hors ligne** d'un comportement nominal en tenant compte des objectifs et des contraintes ; c'est la résolution hors ligne (S_0) du système non linéaire (S_{NL}) pour une trajectoire nominale définie par le triplet (u_0,x_0,y_0).
- par la mise en place d'un modèle linéaire qui décrit les variations **en ligne** du modèle par rapport au comportement nominal. Le système linéarisé est déterminé autour du fonctionnement nominal (u_0,x_0,y_0). Le modèle de commande utilise conjointement le système non linéaire déterminé hors ligne (S_0) et le système linéaire temps variant (S_{LTV}) intégré en ligne à partir de $\Delta u(t)$.

Ainsi :

$$\begin{cases} u(t) = u_0(t) + \Delta u(t) \\ x_m(z,t) = x_0(z,t) + \Delta x_m(z,t) \\ y_m(t) = y_0(t) + \Delta y_m(t) \end{cases} \tag{4.12}$$

Au voisinage du comportement nominal $(u_0(t), x_0(z,t), y_0(t))$, une approximation de l'évolution issue du modèle initial (S_{NL}) décrit en (4.4) est effectuée en utilisant les opérateurs f_d, f_f et h, ce qui mène à formuler le modèle aux équations aux dérivées partielles (S_{LTV}) :

$$(S_{LTV}) \begin{cases} \dfrac{\partial \Delta x_m}{\partial t}(z,t) = \left.\dfrac{\partial f_d}{\partial x_m}\right|_{(x_0,u_0)} \Delta x_m(z,t) + \left.\dfrac{\partial f_d}{\partial u}\right|_{(x_0,u_0)} \Delta u(t) \\ \left.\dfrac{\partial f_f}{\partial x_m}\right|_{(x_0,u_0)} \Delta x_m(z,t) + \left.\dfrac{\partial f_f}{\partial u}\right|_{(x_0,u_0)} \Delta u(t) = 0 \\ \Delta y_m(t) = \left.\dfrac{\partial h}{\partial x_m}\right|_{(x_0,u_0)} \Delta x_m(z,t) + \left.\dfrac{\partial h}{\partial u}\right|_{(x_0,u_0)} \Delta u(t) \end{cases} \tag{4.13}$$

Le problème d'optimisation pénalisé devient alors :

$$\begin{cases} \min\limits_{\Delta p(k)} J(\Delta p(k)) = J\left(\Delta y_m(j), e_y(k), \Delta u(j)\right) + J_{ext}\left(\Delta y_m(j), e_y(k), \Delta u(j)\right) \\ \Delta u(j) = \Delta u(k) = g'(g, \Delta p(k)) \ \forall\, k > 0, \quad \forall\, j \in [k+1, k+N_p] \\ \text{basé sur les résolutions : en ligne du modèle de prédiction } (S_{LTV)} \text{ (4.13) et} \\ \text{hors ligne du modèle } (S_0). \end{cases} \tag{4.14}$$

4.1.3.7 Passage de la dimension finie à la dimension infinie

Avant de pouvoir résoudre le problème d'optimisation pénalisé (4.14), il convient de réaliser une approximation de la solution ou du système non linéaire initial (4.4) et de son linéarisé temps variant (4.13). Comme discuté auparavant, il n'y a pas de méthode universelle, le choix de l'approche se fait une fois la structure du modèle connue.

4.1.3.8 Méthode de résolution itérative

Ce problème d'optimisation pénalisé (4.14) peut donc être résolu par n'importe quel algorithme d'optimisation sans contrainte pour déterminer en ligne, à chaque k, son argument d'optimisation : le vecteur $\Delta p(k)$. L'algorithme de Levenberg-Marquardt est choisi pour ses performances reconnues : il est basé sur le modèle, est efficace, trouve une solution locale, est robuste et est très rapide au voisinage d'un minimum local ([13]). Aussi, cet algorithme utilise un des intérêts de notre approche par linéarisation : les sensibilités nécessaires pour calculer gradients et hessiens utilisés dans l'algorithme de Levenberg-Marquardt peuvent être calculés hors ligne, ce qui réduit aussi le temps de calcul en ligne.

4.2 Encadrement de jeunes chercheurs : bilan

Depuis ma nomination en septembre 2001 sur le poste que j'occupe actuellement, dans cet axe de recherche sur la commande prédictive, j'ai eu l'occasion de participer (officiellement ou non) à l'encadrement de plusieurs jeunes chercheurs que ce soit en stage postdoctoral, thèse de doctorat, ou stage de master recherche (ex DEA).

- 1 Stage post-doctoral :
  (a) 1er octobre 2006-30 juillet 2007, Nawal Daraoui,"Commande prédictive en lyophilisation de produits pharmaceutiques", financé par une bourse de l'Agence Universitaire Francophone (AUF), co-encadré par le Prof. H. Hammouri et P. Dufour (65 %).
- 1 thèse de doctorat officiellement co-encadrée :
  (a) 1er octobre 2005 - 5 décembre 2008, Bruno Da Silva :"Estimation et contrôle de la distribution de la taille des particules lors des procédés de polymérisation en émulsion", thèse de l'UCBL1 au LAGEP co-encadrée par N. Othman HDR, S. Othman HDR, et P. Dufour (40 %)
- 3 thèses de doctorat non officiellement co-encadrées (qui ont chacune abouti au moins à une publication en revue internationale à comité de lecture où je suis co-auteur) :
  (a) janvier 2007 - 6 octobre 2008, Jeroen de Temmerman :"Development of a drying model for the moisture concentration in pasta with control design of the drying air properties", thèse de la Katholieke Universiteit Leuven (KUL), division mécatronique, bio-statistique et capteurs (MeBioS), co-encadrée par Prof H. Ramon (KUL) et B. Nicolaï (KUL).
  (b) mai 2006 - 29 novembre 2007 : Isabelle Bombard :"Modélisation expérimentale et théorique de la cuisson de peintures en poudre", thèse de l'UCBL1 au LAGEP co-encadrée par l'ADEME et 3 industriels (EDF, Dupont, Philipps) et par le Prof. J. Lieto, P. Laurent.
  (c) octobre 2002 - octobre 2003 : David Edouard :"Modélisation et supervision d'un réacteur à inversion de flux pour la destruction de composés

organiques", thèse du LGPC (UMR 2214) CPE/CNRS, co-encadrée par le Prof D. Schweich (LGPC) et le Prof H. Hammouri (LAGEP).

- De l'ordre d'un stagiaire de DEA/M2R tout les 2 ans en moyenne. Si cela n'est pas précisé, les co-encadrants sont des membres du LAGEP.
  (a) printemps 2009 : Firas Rouissi,"Commande prédictive d'un système biologique : comparaison entre les approches par linéarisation et non linéaire", stage de fin d'études de Master STS mention Génie Electrique Génie des Procédé, parcours Génie des Systèmes Automatisés UCBL1, co-encadré par M. Nadri-Wolf et P. Dufour (50%)
  (b) printemps 2007 : Mustapha Balhousse,"Commande prédictive expérimentale d'un modèle de cuisson de peinture en poudre par infrarouge", stage de fin d'études de Master STS mention Génie Electrique Génie des Procédé, parcours Génie des Procédés, UCBL1, co-encadré par P. Laurent, I. Bombard, B. Da Silva et P. Dufour (30%)
  (c) printemps 2006 : Kamel Abid,"Commande prédictive sur un procédé de cuisson de peinture en poudre avec de l'infrarouge", stage de fin d'études de Master ST mention Sciences de l'Information, des Dispositifs et des Systèmes, parcours Génie des Procédés de l'UCBL1, co-encadré par P. Laurent, I. Bombard et P. Dufour (80%)
  (d) printemps 2004 : Rachid Errouissi,"Commande prédictive d'un canal d'irrigation", stage de fin d'études de DEA Ingénierie des Systèmes Automatisés de l'UCBL1, co-encadré par L. Lefèvre et P. Dufour (60%)
  (e) printemps 1999 : Mohamed Larabi,"Contrôle expérimental du séchage de peinture", stage de fin d'études de DEA Automatique Industrielle de l'UCBL1, co-encadré par P. Laurent, D. Blanc, P. Dufour (60%).

4.3 Thèse (IFP, LGPC, LAGEP) d'Edouard : procédé de dépollution d'air par catalyse

4.3.1 Introduction

Dans le cadre de la thèse de doctorat en Génie des Procédés de David Edouard à laquelle j'ai participé (néanmoins sans être encadrant officiel), nous avons pu valider en simulation certaines de mes idées sur la commande prédictive. Cette thèse, du LGPC (UMR 2214) CPE/CNRS, avait pour titre "Modélisation et supervision d'un réacteur à inversion de flux pour la destruction de composés organiques". Ce travail se situait dans une collaboration entre le Prof. D. Schweich (LGPC) et le Prof. H. Hammouri (LAGEP).
L'objectif de cette thèse était de travailler sur un procédé pilote issu de l'IFP et existant au LGPC concernant la dépollution par réaction catalytique de gaz polluants présents dans une extraction d'air. Des aspects de modélisation fondamentale y ont été étudiés, suivi d'aspects théoriques et appliqués de design d'observateur et de

commande multivariable optimale. L'objectif principal du travail que j'ai co-encadré était de piloter en ligne les 2 variables de commande (permettant de chauffer et de refroidir) pour que ce réacteur fonctionne dans tous les cas de figures.
J'ai participé à ces travaux d'octobre 2002 à octobre 2003, pour la partie commande.

4.3.2 Commande : objectifs et modèle

Les problèmes de pollution de l'environnement liés à la production industrielle sont de plus en plus importants. De ce fait, les réglementations portant sur les rejets de composés organiques volatils (COV) dans l'atmosphère sont de plus en plus sévères. Si la définition même des COV reste encore floue, ils sont communément assimilés à des produits nocifs dont la réactivité chimique les rend susceptibles d'intervenir dans des processus de pollution atmosphérique. A ce titre, ils sont source de nombreux méfaits : pluies acides, dépérissement des forêts, effet de serre, troubles de la santé, etc. Produits en quasi-totalité par l'homme, la réduction d'émission des COV constitue donc une priorité, d'autant plus que la source de ce problème touche un large champ d'activités économiques : des usines jusqu'aux PMI en passant par les pressings, etc.
Parmi les méthodes classiques possibles de réduction des COV (qui peuvent également se compléter), le choix s'effectue en fonction des éléments à éliminer, de leur niveau de concentration ainsi que de leur débit. Parmi celles-ci, la technique utilisée ici emploie les modes récupératifs permettant la diminution de l'apport d'énergie. Les températures requises à l'oxydation catalytique sont nettement inférieures à celles nécessaires en incinération thermique. La catalyse, c'est-à-dire la réaction des éléments polluants au contact de matériaux précieux, s'effectue entre 300 deg C et 400 deg C en dessous des températures nécessaires dans l'incinération thermique. Cette technologie, utilisant le mode récupératif, est donc intéressante pour la destruction des COV à moindre coût énergétique tout en respectant les normes en vigueur [8].
Afin d'étudier et de modéliser les phénomènes physico-chimiques, un procédé pilote de laboratoire a été réalisé au sein du LGPC. Ce réacteur (cf. Fig. 4.1 et 4.2) est constitué de 2 monolithes thermiques et inertes de même longueur (aux extrémités), de 2 monolithes catalytiques de même longueur (des catalyseurs sont présents à la surface des canaux) et d'une partie centrale vide. Grâce à 2 paires de vannes commandées en alternance, l'idée est de faire passer le gaz pollué dans un sens pendant une demi période, puis dans l'autre sens pendant la demi période suivante (et ainsi de suite). Ainsi, la chaleur due à la réaction de dépollution est emprisonnée dans le réacteur. La température en sortie du réacteur est donc proche de la température ambiante. Ceci permet aussi de pré chauffer dans les monolithes inertes le gaz entrant qui sera dépollué dans les 2 monolithes catalytiques.

Le mode de fonctionnement de ce réacteur à inversion de flux [27] dépend très principalement des conditions opératoires (le niveau de polluant dans le gaz à l'entrée du réacteur, qui n'est pas mesuré) qui implique 3 modes de fonctionnement assez variés (Fig. 4.3 et Fig. 4.4) :

- un apport de gaz de concentration trop faible en COV provoquera, par son

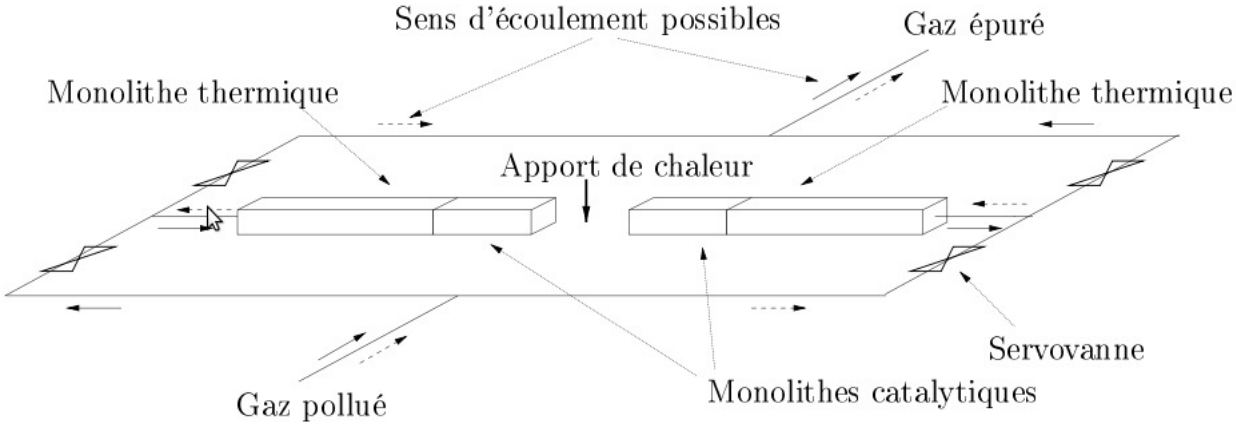

FIGURE 4.1 – Schéma de principe du procédé de destruction catalytique des COV.

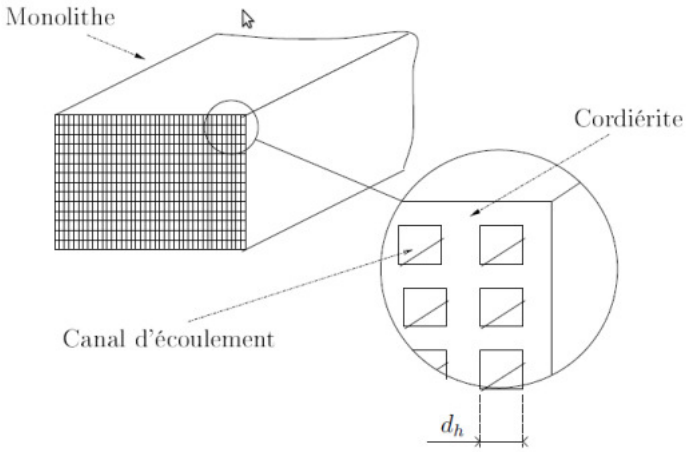

FIGURE 4.2 – Section d'un monolithe.

faible apport énergétique, une baisse de la température du réacteur en dessous du minimum requis pour que la réaction ait lieu (ici 450 K), et donc son extinction. Pour ce procédé, un ajout variable commandable de chaleur dans la zone centrale a été retenu comme solution.

- un apport de gaz de concentration trop élevée en COV, en provoquant une surchauffe du réacteur au-delà du maximum autorisé (ici 600 K), altérera ses capacités de catalyse. Pour ce procédé, une utilisation d'un bypass pour détourner un débit variable commandable du gaz froid d'entrée vers la zone centrale pour le refroidir a été retenue comme solution.
- un apport de gaz de concentration "moyenne" en COV permettra de fonctionner en autotherme (c'est-à-dire sans apport d'énergie extérieure et au débit maximum de traitement).

En ce qui concerne la perturbation d'entrée, l'élévation adiabatique de la température ($\Delta T_{ad}(t)$) varie entre 0 K et 30 K dans un usage industriel réel. Afin d'éviter

tout accident, les pires cas doivent cependant être évalués en simulation. $\Delta T_{ad}(t)$ est donc censée varier de façon assez aléatoire entre 0 K et 115 K (Fig. 4.3). Dans cette condition d'entrée, si aucun contrôle n'est appliqué au réacteur, la température à l'entrée du monolithe catalytique (dite au point chaud) ne peut être maintenue entre les deux limites de température de fonctionnement (450 K et 600 K) (Fig. 4.4). Cela justifie clairement la nécessité d'un contrôle en boucle fermée. Dans ce procédé, en quelques secondes, la température du gaz peut donc s'élever à partir de la température ambiante de plusieurs centaines de degrés sur moins d'un demi-mètre du réacteur, pour ensuite redescendre à la température ambiante sur moins d'un demi-mètre avant que le gaz soit relâché en sortie du réacteur.

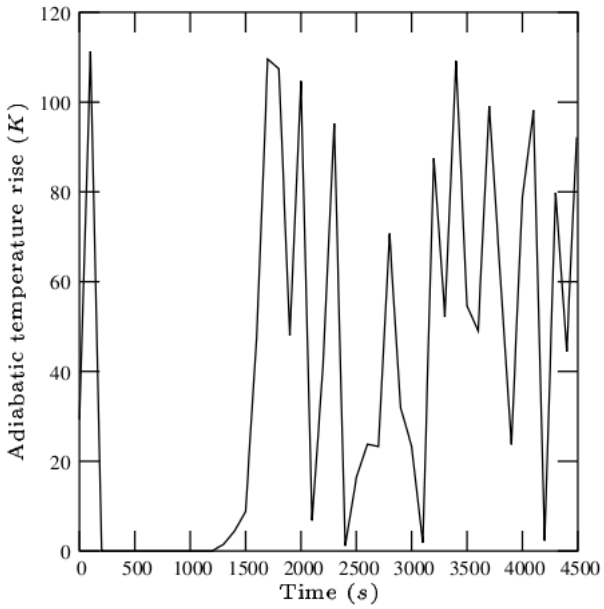

FIGURE 4.3 – Perturbation d'entrée $\Delta T_{ad}(t)$: signature du polluant en termes d'élévation adiabatique de la température.

Jusqu'alors, très peu de travaux ont porté sur la conduite de ce procédé, notamment le contrôle multivariable. Ici, on cherche à limiter la température au point chaud entre les deux limites de température, afin d'assurer une conversion complète des polluants et de prévenir une surchauffe du catalyseur. La complexité de ce procédé comprend : les aspects distribués, le comportement dynamique non linéaire, le comportement à non minimum de phase (et réparti) et l'inversion périodique de la circulation de gaz.
Initialement, le modèle fondamental considère dans chacune des 5 zones (2 monolithes thermiques, 2 monolithes catalytiques, 1 zone centrale), 4 grandeurs physiques : la concentration et la température du gaz dans les canaux d'écoulement, la concentration et la température dans la partie solide en cordiérite [34]. On considère que les phénomènes sont instantanés dans les canaux d'écoulement et que dans la

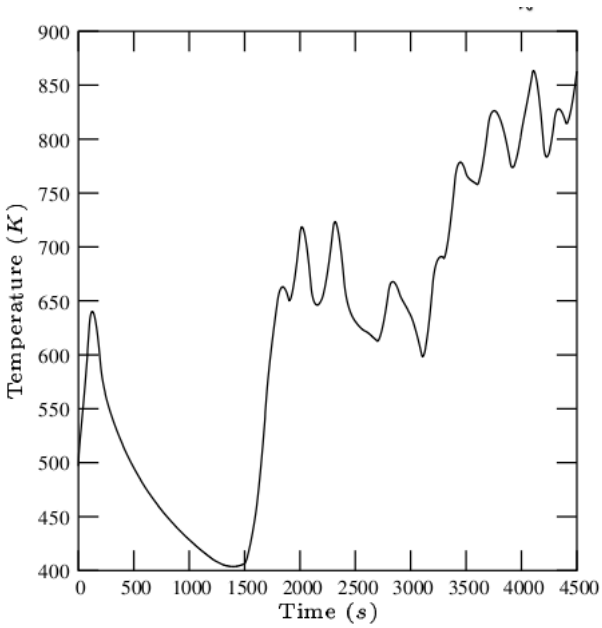

FIGURE 4.4 – Impact de la perturbation d'entrée sur la sortie (sans action de commande) : température au point chaud.

partie solide, la dynamique de la concentration est négligeable par rapport à celle de la température. On arrive donc à l'utilisation pour la commande d'un modèle non linéaire à paramètres répartis et à commande frontière avec 5 équations dynamiques, 15 équations algébriques et 24 conditions aux frontières [ARIACL02] [6] . L'influence du nombre de points de discrétisation (volumes finis) du modèle et de la valeur donnée à l'horizon de prédiction a été mise en évidence [ARIACL05] [7] . Le nombre de points de discrétisation ne doit pas être trop élevé afin de laisser à l'algorithme de commande prédictive (basé sur les prédictions du modèle) assez de temps pour pouvoir déterminer une commande satisfaisant le cahier des charges. Cependant, si le nombre de points de discrétisation est trop faible, le modèle fournit une trop mauvaise prédiction, ce qui diminue les performances en boucle fermée. Ce modèle est cependant trop complexe pour être utilisé dans une synthèse d'observateur : en effet, le procédé pilote ne dispose que de 3 mesures de température à l'intérieur du procédé, et la concentration d'entrée (une très forte perturbation comme on a pu le voir) est stochastique et non mesurée.
Le modèle considéré ici pour la conception de l'observateur et du contrôleur du réacteur catalytique à inversion de flux profite de la haute fréquence de l'inversion périodique de la circulation de gaz : c'est un modèle pseudo-homogène [11] basé sur une seule équation aux dérivées partielles et 2 équations algébriques et qui tient compte d'une correction sur l'inversion périodique (θ). Le schéma de principe est donné (Fig. 4.5). θ a un impact non négligeable sur le fonctionnement, mais n'est

6. Publication personnelle : référence complète dans la partie CV (2.7).
7. Publication personnelle : référence complète dans la partie CV (2.7).

pas considéré ici comme variable de commande. Après normalisation des variables,

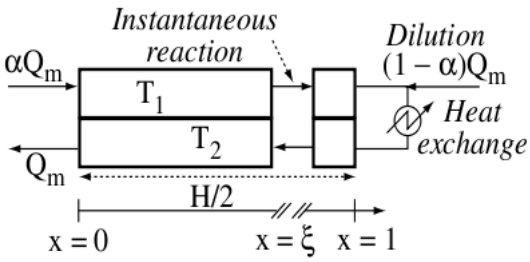

FIGURE 4.5 – Schéma de principe du modèle contre courant pseudo-homogène.

nous obtenons le modèle suivant (plus de détails sur les paramètres sont donnés dans [ARIACL07] [8] , page 852) :

$$\begin{cases} (\frac{1}{P_{ax_\theta}} + \frac{1+\alpha^2}{2P_\theta})\frac{\partial^2 T_s(x,t)}{\partial x^2} + \frac{1-\alpha}{2}\frac{\partial T_s(x,t)}{\partial x} + P_\theta \Delta T_{ad}(t)\psi(x,t) = \tau\frac{\partial T_s(x,t)}{\partial t} \\ \alpha\frac{\partial \omega_1(x,t)}{\partial x} + P_\theta\omega_1(x,t) = 0, \quad -\frac{\partial \omega_2(x,t)}{\partial x} + P_\theta\omega_2(x,t) = 0 \end{cases} \tag{4.15}$$

où :

$$\begin{cases} P_\theta = \frac{ha_cH}{2\rho_0 u_{v0} c_{pmg}}(1-\frac{\theta}{2\tau}), \quad \frac{1}{P_{ax_\theta}} = \frac{2\lambda^s_{ax}}{(H\rho_0 u_{v0} c_{pmg})(1-\frac{\theta}{2\tau})}, \\ \tau = \frac{(1-\varepsilon)\rho_s c_{ps} H}{2\rho_0 u_{v0} c_{pmg}}, \quad \Delta T_{ad}(t) = \frac{\Delta H}{M c_{pmg}}\omega_{10}(t), \quad \psi(x,t) = \varphi(x)\frac{\omega_1(x,t)+\omega_2(x,t)}{2\omega_{10}(t)}, \\ x = \frac{z}{H/2} \end{cases} \tag{4.16}$$

où t est le temps, x (avec $0 < x < 1$) est la nouvelle variable d'espace normalisée issue de la variable d'espace initiale z (H est la longueur totale des 4 monolithes), $\varphi(x)$ décrit le type de monolithe : $\varphi(x) = 0$ pour le monolytique inerte ($x < \xi_\theta$) et $\varphi(x) = 1$ pour le monolytique catalytique ($x \geq \xi_\theta$).
Les 2 conditions frontières sont :

- en $x = 0, t > 0$, à l'entrée du réacteur :

$$\begin{cases} \omega_1(x,t) = \omega_{10}(t) \\ T_{g1}(x,t) = T_0(t) \end{cases} \tag{4.17}$$

8. Publication personnelle : référence complète dans la partie CV (2.7).

- et en $x = 1, t > 0$, dans la partie centrale du réacteur :

$$\begin{cases} (1+N')(T_{g2}(x,t) - T_0) = \alpha(T_{g1}(x,t) - T_0) + \dfrac{Q_j}{S\rho_0 u_{v0} C_{pmg}} \\ T_{g1}(x,t) = T_s(x,t) - \dfrac{\alpha}{P_\theta}\dfrac{\partial T_s(x,t)}{\partial x} \\ T_{g2}(x,t) = T_s(x,t) + \dfrac{1}{P_\theta}\dfrac{\partial T_s(x,t)}{\partial x} \\ \alpha\omega_1(x,t) = \omega_2(x,t) \end{cases} \tag{4.18}$$

La condition initiale est, à $t = 0$ et $\forall x \in [0, 1]$:

$$T_{g1}(x,t) = T_{g2}(x,t) = T_s(x,t) = T_0 \tag{4.19}$$

Dans ces équations, T_0 est la température ambiante et d'entrée, T_s est celle dans le solide et T_{g1} et T_{g2} sont respectivement les températures du gaz dans les parties entrée et sortie du réacteur. ω_1 et ω_2 sont les fractions massiques de polluant dans les parties entrée et sortie du réacteur. Les pertes thermiques N', le taux de dilution $(1-\alpha)$ (le pourcentage d'air frais détourné de l'entrée), et la puissance de chauffe Q_j sont pris en compte dans la condition limite en $x = 1$. La perturbation d'entrée ΔT_{ad} intervient explicitement à la fois dans la condition à la limite sur l'entrée (comme auparavant) et aussi désormais sur la dynamique de la température.
Ce système est certes plus simplifié qu'auparavant [ARIACL05] [9] en termes de nombre d'équations à résoudre, mais il a gagné en complexité structurelle et en non linéarité : par exemple, la commande de dilution α apparait dans plus d'équations qu'auparavant.
Basé sur ce modèle, une commande multivariable en boucle fermée est étudiée [ARIACL07] [10] : le but est de régler les actions de chauffage Q_j et de refroidissement α de telle façon que la concentration en sortie du réacteur soit inférieure au minimum requis et que la température au point chaud (la sortie à commander) reste bien dans la zone de fonctionnement souhaité du réacteur (entre 450K et 600K). La loi de commande doit compenser l'influence de la perturbation d'entrée $\Delta T_{ad}(t)$. D'un autre côté, la réaction a principalement lieu à l'entrée des monolithes catalytiques et est instantanée [35]. Par conséquent, au lieu de contrôler le profil complet de température, seule la température à l'entrée des monolithes catalytiques (dite point chaud) doit être maintenue entre 450 K et 600 K.

4.3.3 Commande : résultats

4.3.3.1 Retour de sortie sans estimation de la perturbation d'entrée

Dans les 1ères simulations, nous faisons l'hypothèse que seule la température du point chaud est mesurée ainsi que la concentration de sortie. De fait, nous avons une commande prédictive par retour de sortie. On fait aussi l'hypothèse que la perturbation d'entrée suit le même comportement que celui donné en (Fig. 4.3), mais que

9. Publication personnelle : référence complète dans la partie CV (2.7).
10. Publication personnelle : référence complète dans la partie CV (2.7).

le contrôleur ne connaisse pas cette information. Elle est donc supposée constante dans le temps (avec une valeur à choisir). La simulation montre que les performances en boucle fermée (Fig. 4.6) sont bien meilleures qu'en boucle ouverte (Fig. 4.4) : la concentration en sortie est toujours inférieure au maximum fixée, et n'est donc pas en fait un point limitant dans l'optimisation. Les 2 contraintes posées sur la température sont bien plus souvent satisfaites qu'en boucle ouverte, mais sont parfois violées (ce qui est techniquement faisable dans notre approche du fait des pénalités externes : le cas le moins défavorable est déterminé). Les actions de commande pourraient donc être mieux réglées avec une structure de commande utilisant des mesures ou estimations des propriétés d'entrée du gaz.
Cela montre clairement la nécessité d'utiliser un observateur, puisque les deux contraintes de sorties sur la température ne sont pas toujours satisfaites (Fig. 4.6). Cela souligne aussi clairement, comme prévu, le fort impact de la perturbation d'entrée stochastique sur les résultats du contrôle en boucle fermée et l'importance d'en tenir compte dans la tâche d'optimisation.

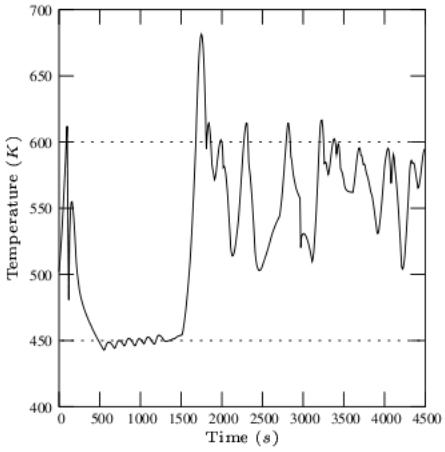

FIGURE 4.6 – Sortie en boucle fermée (sans estimation de la perturbation d'entrée) : température au point chaud.

4.3.3.2 Retour de sortie avec estimation de la perturbation d'entrée

Grâce au modèle utilisé dans la commande, un observateur à grand gain est maintenant utilisé [11] pour estimer en ligne, à partir de 3 mesures de température existantes sur le procédé réel, la concentration d'alimentation (agissant comme une perturbation d'entrée importante) et le profil de température dans le réacteur. Seule l'estimation de la concentration d'alimentation est utilisée ici en plus par rapport au cas précédent. Dans les mêmes conditions que précédemment, ceci montre que la commande prédictive permet désormais de satisfaire les contraintes sortie en tout

temps (Fig. 4.7), ce qui est un point important requis par le problème d'optimisation sous contrainte [ARIACL07] [11] . On peut voir deux intervalles de temps différents :

- Pour 0 <t <1300 s, $\Delta T_{ad}(t)$ est "faible" (Fig. 4.3) et l'extinction du procédé est évitée par l'apport en énergie électrique dans le réacteur (Fig. 4.9). Dans l'intervalle, il n'y a pas d'action de refroidissement (sauf un pic au début) et le volume maximum de gaz est donc traité (Fig. 4.8).
- Lorsque t> 1500 s, $\Delta T_{ad}(t)$ devient important (Fig. 4.3) et une surchauffe du procédé est évitée (voir la contrainte limite supérieure de la Fig. 4.7) en raison de l'utilisation correcte de l'action de refroidissement (Fig. 4.8). L'inconvénient est que ce contrôleur peut parfois demander de chauffer et de refroidir en même temps, ce qui ne devrait pas se produire : l'optimisation devrait pouvoir être améliorée pour éviter ce problème, via l'ajout de contraintes sur les actionneurs.

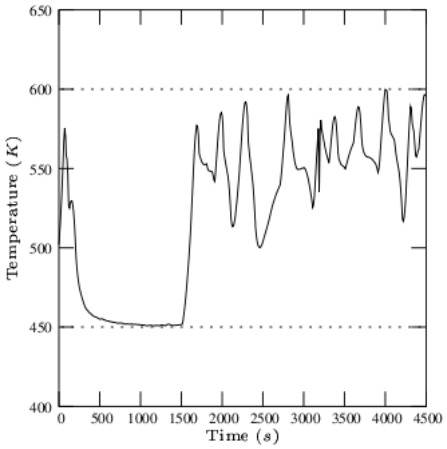

FIGURE 4.7 – Sortie en boucle fermée (avec estimation de la perturbation d'entrée) : température au point chaud.

4.3.4 Conclusion

Le but de notre travail était de limiter la température du point chaud entre deux limites de température, afin d'assurer une destruction complète des polluants et d'empêcher une surchauffe du catalyseur. La complexité de ce procédé couvrait divers aspects : distribué, non linéaire, inversion périodique de la circulation du fluide et système à non minimum de phase. Jusqu'alors, très peu de travaux avaient porté sur le contrôle de ce procédé, notamment le contrôle multivariable optimal. Dans ce travail, nous avons comparé deux approches de commande (sans puis avec un observateur pour estimer la perturbation d'entrée qui avait un très fort impact sur la sortie). En dépit d'une forte perturbation d'entrée due aux variations stochastiques

11. Publication personnelle : référence complète dans la partie CV (2.7).

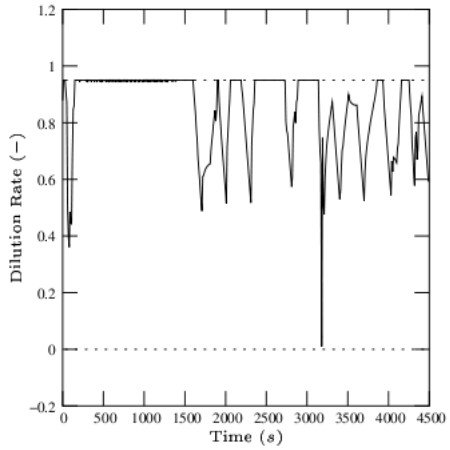

FIGURE 4.8 – Commande en boucle fermée (avec estimation de la perturbation d'entrée) : refroidissement.

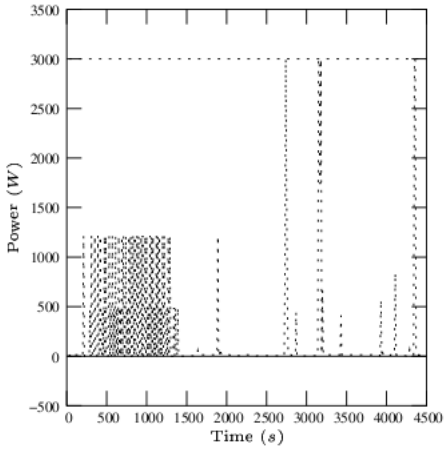

FIGURE 4.9 – Commande en boucle fermée (avec estimation de la perturbation d'entrée) : chauffage.

de la concentration d'alimentation, la loi de commande avec observateur étudiée ici était robuste, car la température pouvait être maintenue à l'intérieur de l'enveloppe de température spécifiée. Les résultats étaient nettement améliorés par rapport à une approche sans commande, et l'importance de l'observateur a pu être remarquée. Le réacteur, commandé de la sorte, peut donc être utilisé dans des conditions ambiantes différentes, ce qui est très intéressant en milieu industriel.
Ce travail a donné lieu à 1 article de revue internationale avec comité de lecture [ARIACL07] [12] , 1 communication publiée lors d'un congrès international avec comité de sélection et sans acte [CIACSSA04] [13] , et 2 communications publiées lors de

12. Publication personnelle : référence complète dans la partie CV (2.7).
13. Publication personnelle : référence complète dans la partie CV (2.7).

congrès nationaux avec comité de sélection et sans acte [CNACSSA01] [14] .
David Edouard est actuellement Maître de Conférences à l'Université de Strasbourg (LMSPC, UMR 7515 CNRS).

4.4 Thèse (LAGEP) de Da Silva : procédé de polymérisation en émulsion

4.4.1 Introduction

Dans le cadre de la thèse de doctorat en automatique et génie des procédés de Bruno Da Silva à laquelle j'ai participé officiellement, nous avons pu travailler sur la commande prédictive d'un système très complexe à modéliser. Cette thèse du LAGEP avait pour titre "Contribution au contrôle de la distribution de la taille des particules lors d'un procédé de polymérisation en émulsion".
L'objectif principal était, pour un procédé de polymérisation en émulsion, d'étudier les possibilités d'utiliser un modèle fondamental très complexe dans une approche de commande prédictive. Il fallait voir comment traduire un objectif sur une caractéristique cible liée au produit en fin de production en un objectif de conduite pendant le cycle de production. Dans cette conduite, il fallait aussi étudier l'impact d'une des incertitudes paramétriques sur les performances en boucle fermée. Pour cela, les 2 actions de commande choisies (débits de tensio-actif et de monomère) devaient être faites en ligne.
J'ai co-encadré officiellement à 40% cette thèse de doctorat sur bourse du ministère de la recherche, du 1er octobre 2005 au 5 décembre 2008, avec Nida Othman, HDR au LAGEP et Sami Othman, HDR au LAGEP.

4.4.2 Commande : objectifs et modèle

Un polymère est une association de nombreuses molécules plus petites, appelées monomères. Le procédé de polymérisation en émulsion est un procédé où la modélisation, l'observation et la commande de la distribution de taille de particules sont essentielles mais encore relativement peu étudiées car très complexes à modéliser, à mesurer, et donc à commander. La bonne dissipation de la chaleur, la faible viscosité et la vitesse de réaction élevée font du procédé de polymérisation en émulsion, un procédé très répandu dans la production de polymères. Le milieu réactionnel est composé de deux phases : une phase aqueuse continue et une phase dispersée de gouttelettes de monomère stabilisées par un tensioactif. Le milieu résultant, les particules de polymère formées en suspension dans l'eau, est communément appelé latex ou émulsion. Les propriétés du polymère sont liées à de nombreux paramètres, notamment la distribution de la taille des particules et la distribution de la masse

14. Publication personnelle : référence complète dans la partie CV (2.7).

molaire de polymère. Ces propriétés d'usage déterminent les caractéristiques rhéologiques, optiques et mécaniques du polymère, ou encore la stabilité du latex. Dans la phase aqueuse, les radicaux issus de la décomposition de l'amorceur réagissent avec le monomère et forment des espèces appelées oligoradicaux. Si la concentration en tensioactif libre dans la phase aqueuse est supérieure au seuil de concentration micellaire critique (CMC), les micelles capturent des oligoradicaux et deviennent des particules. Ces particules, une fois formées, continuent de croître et sont stabilisées par le tensioactif libre. La nucléation micellaire s'achève lorsque la concentration en tensioactif libre en phase aqueuse est inférieure à la CMC, qui est donc un comportement important à surveiller.
Dans cette thèse, l'objectif majeur était de proposer des solutions pour le contrôle en boucle fermée de la réaction en vue d'obtenir une distribution de la taille des particules finale voulue de la taille des particules. Le 1er problème d'intérêt est que la mesure de la distribution de la taille des particules est difficilement disponible en ligne. Cependant, [37] ont étudié la contrôlabilité théorique des équations de bilan de population de ce système. Ils ont conclu que la concentration en tensioactif est la variable de commande principale du nombre de particules et donc de la distribution de tailles des particules dans la polymérisation en émulsion. Dans un 1er travail précédent [CIACSAA16] [15] , la relation entre la trajectoire de concentration en tensioactif libre et la distribution de tailles des particules finale a été démontrée. En parallèle, le contrôle de la concentration du monomère dans les particules de polymère nous permet d'éviter la présence de gouttelettes de monomère qui pourrait déstabiliser le latex et retarder la nucléation des particules de manière imprévisible. En outre, le contrôle de la concentration du monomère dans les particules de polymère affecte la croissance des particules et donc a une incidence directe sur la distribution de tailles des particules. Pour ces raisons, on considère comme mesures plus facilement disponibles en ligne que la distribution de tailles des particules : la concentration de tensioactif libre dans la phase aqueuse disponible par conductimétrie et la concentration du monomère dans le réacteur disponible par calorimétrie. Deux variables de contrôle sont manipulées dans la stratégie proposée : les débits de tensioactif et de monomère. Deux contrôleurs mono-variables pourraient être synthétisés mais le découplage ne serait cependant pas parfait et donc nous préférons synthétiser un unique contrôleur multivariable. Une stratégie de commande par inférence à 2 étapes est utilisée pour obtenir la distribution de tailles des particules bimodale cible. Ces 2 étapes sont :

1. Basée sur une distribution de tailles des particules bimodale cible, la trajectoire théorique de la concentration de tensioactif libre à suivre au cours de la réaction est calculée hors-ligne par optimisation basée sur le modèle le plus détaillé. Le débit de tensioactif est variable alors que le débit de monomère est maintenu constant. En effet, avec un débit de monomère différent, la croissance des particules certes change (ainsi que la quantité totale de tensioactif) mais la concentration voulue de tensioactif libre serait la même pour une distribution de tailles des particules cible. Ceci permet donc de réduire le nombre de

15. Publication personnelle : référence complète dans la partie CV (2.7).

variables d'optimisation.

2. Cette trajectoire de concentration de tensioactif libre théorique est ensuite utilisée dans l'un des objectifs de contrôle : un problème de suivi de trajectoire est alors défini pour contrôler la concentration de tensioactif dans la phase aqueuse et est combiné à un problème de régulation contraint de la concentration du monomère dans les particules de polymère (pour maximiser la concentration en monomère mais en évitant la présence de gouttelettes). Les mesures en ligne sont la concentration sans tensioactif (par conductimétrie) et la concentration du monomère (par calorimétrie). Les débits de tensioactif et de monomère sont réglés en ligne par commande prédictive et sont limités dans leur amplitude.

Cette stratégie en 2 étapes repose donc sur un modèle. La modélisation des processus de polymérisation en émulsion conduit à des modèles complexes décrivant les différents phénomènes physico-chimiques. Les modèles décrivant l'évolution de la distribution de la taille des particules sont relativement présents dans la littérature. Ce type de modèle est régi par des équations aux dérivées partielles non linéaires, ce qui complexifie considérablement la synthèse de lois de commande. Le bilan de population de particules est important pour décrire la nucléation des particules, la croissance et la coagulation si nécessaire. Le bilan de matières des différents composants (initiateur, radicaux, monomère et tensioactif) doit être considéré dans la phase continue et dispersée. Le modèle utilisé ici est décrit en détail dans la thèse de Bruno da Silva [TDOCES01] [16] . Il y a :

- 2 entrées de commande manipulables (le débit de monomère et le débit de tensioactif),
- Un vecteur d'état à 8 composantes (dont 2 issues d'équations aux dérivées partielles) :
- 2 sorties à contrôler et mesurables en ligne : la concentration de tensioactif libre (par conductimétrie) et la concentration de monomère (par calorimétrie).

Le modèle est long à formuler (plusieurs pages) et complexe, comme on peut le voir sur une partie de ce modèle :

$$\begin{cases} \dfrac{\partial n(r,t)}{\partial t} = -\dfrac{\partial}{\partial r}\Big(G(r,t)\bar{n}(r,t)n(r,t)\Big) \\ \dfrac{\partial \bar{n}(r,t)}{\partial t} = \rho(r,t)\Big(1-2\bar{n}(r,t)\Big) + \dfrac{\partial}{\partial r}\Big(G(r,t)\bar{n}(r,t)n(r,t)\Big)\left(\dfrac{\bar{n}(r,t)-1}{n(r,t)}\right) \\ +k_{des}(r,t)\left(\dfrac{\rho_{ent-m}(r,t)[\bar{n}(r,t)-1]}{\rho(r,t)+[M]_p(t)(k_{pe}+k_{tr})+k_{des}(r,t)} - \dfrac{k_{tr}[M]_p(t)\bar{n}(r,t)}{\rho(r,t)+[M]_p(t)(k_{pe}+k_{tr})+k_{des}(r,t)}\right) \\ \qquad \forall\ (r,t) \in [r_{nuc}, r_{max}]\times]0,t_f] \end{cases} \tag{4.20}$$

où les conditions aux frontières s'écrivent :

16. Publication personnelle : référence complète dans la partie CV (2.7).

$$\begin{cases} n(r_{nuc}, t) = \dfrac{R_{nuc}(t)}{G(r_{nuc,t})}, \ \forall\, t > 0 \\ \bar{n}(r_{nuc}, t) = 1, \ \forall\, t > 0 \end{cases} \tag{4.21}$$

et où les conditions initiales associées sont :

$$\begin{cases} n(r, 0) = 0, \ \forall\, r \in [r_{nuc}, r_{max}] \\ \bar{n}(r, 0) = 1, \ \forall\, r \in [r_{nuc}, r_{max}] \end{cases} \tag{4.22}$$

avec notamment :

- une des variables d'état, $n(r, t)$: densité de particules de taille r à un instant t,
- une des variables d'état, $\bar{n}(r, t)$: nombre moyen de radicaux dans les particules de taille r à l'instant t,
- $G(r, t)$: croissance d'une particule de taille r à un instant t, qui dépend de l'état,
- une des 2 sorties, $[M]_p(t)$: concentration de monomère dans les particules à un instant t,
- $R_{nuc}(t)$: la vitesse de nucléation R_{nuc} à un instant t, qui dépend de l'état.

4.4.3 Commande : résultats

Précédemment, nous avons vu que la commande de ce procédé se ferait en 2 étapes : la 1ère hors ligne pour déterminer le comportement optimal, et la 2nde en ligne afin de se rapprocher réellement le plus possible de ce comportement optimal. Nous allons voir les résultats liés à ces 2 étapes.

4.4.3.1 Etape hors ligne : détermination de trajectoire de référence

On a vu précédemment que la concentration en tensioactif peut être considérée comme une variable de contrôle direct de la distribution de tailles des particules [CIACSAA16] [17] . [9] a utilisé une méthode de programmation quadratique séquentielle pour calculer le débit optimal de qui donne la distribution de tailles des particules désirée. [20] ont utilisé un algorithme génétique pour obtenir l'optimum global. Ces algorithmes sont stochastiques et itératifs et utilisent des méthodes de tirs aléatoires. Le choix des paramètres de réglage impliqués dans ces algorithmes est assez difficile.
Dans notre thèse, pour cette 1ère étape, une méthode d'optimisation déterministe basé sur le modèle est utilisée. Le problème d'optimisation présenté ici est formulé en utilisant les paramètres suivants : le temps de simulation est de 420 min et est divisé en 12 intervalles de 35 min chacun. L'optimisation vise à trouver la séquence de 12 valeurs de débit de tensioactif qui mène la distribution de tailles des particules finale vers sa cible. Des contraintes supplémentaires sont ajoutées afin d'assurer la stabilité des particules et d'éviter leur coagulation : les particules de polymère

17. Publication personnelle : référence complète dans la partie CV (2.7).

doivent toujours être saturées en tensioactif. Même avec ces contraintes, le résultat d'optimisation ne serait pas unique (la concentration de tensioactif libre peut prendre n'importe quelle valeur entre 0 et légèrement inférieure à la CMC quand la nucléation n'est pas souhaitée). Toutefois, ceci n'est pas un problème puisque, dans le but de provoquer la nucléation, la concentration de tensioactif libre devrait dépasser la CMC et donc la quantité totale de tensioactif serait identique dans tous les cas. Le débit de monomère $Q_m(t)$ est donc fixé constante d'une manière à éviter la présence de gouttelettes de monomère (une valeur intéressante est trouvée à partir d'essais-erreurs). La fonction lsqnonlin de la boîte à outils Matlab optimisation est utilisée pour minimiser la norme euclidienne entre la distribution de tailles des particules finale désirée et celle simulée. La trajectoire optimale désirée de concentration de tensioactif libre est donc le résultat de la séquence de débit de tensioactif optimisé (Fig. 4.10). On peut voir que la nucléation des particules a bien lieu dès que la concentration de tensioactif libre dépasse la CMC, pendant les quinze minutes d'abord, en raison de la concentration initiale tensioactif et après 325 minutes grâce à l'optimisation. Ainsi, une distribution de tailles des particules bimodale est obtenue, qui est très proche de la distribution de tailles des particules objectif prescrite. Cette concentration optimale de libre est utilisée dans la seconde étape dans le problème de suivi de trajectoire en ligne, afin de “guider“ le procédé pour obtenir une distribution de tailles des particules réelle finale proche de l'objectif prescrit.

4.4.3.2 Etape en ligne : conduite du procédé

Pour l'étape en ligne liée à la conduite en ligne du procédé, un problème d'optimisation couplé à 2 entrées et 2 sorties est posé :

- La 1ère partie concerne le problème de suivi de trajectoire de la concentration en tensioactif libre de sa trajectoire de référence ($[S]_{wref}$) calculée précédemment par optimisation hors ligne. La mesure de cette sortie est disponible en ligne par conductimétrie.
- La 2nde partie concerne le contrôle de la concentration en monomère qui doit permettre à la fois de limiter la présence de gouttelettes et de maximiser le taux de croissance des particules (affectant par conséquent la distribution de tailles des particules). Le dépassement de $[M]_p^{SAT}$ pourrait avoir des effets néfastes sur la stratégie de contrôle de la distribution de tailles des particules car cela déstabilise les particules. L'objectif a été fixé de ”maximiser“ $[M]_p$ en la maintenant au plus près mais en dessous de 95% de sa valeur de saturation $[M]_p^{SAT}$. La mesure de cette sortie est disponible en ligne par calorimétrie.

Il est évident qu'un régulateur PID ne serait pas en mesure de ”maximiser” $[M]_p$ de la sorte, dans un problème de régulation tout en le maintenant toujours au-dessous du point de consigne défini : la sortie contrôlée pourrait osciller autour de cette consigne, ce qui n'est pas autorisé ici. L'objectif de contrôle multivariable est à atteindre en manipulant les 2 variables d'entrée : les débits de tensioactif Q_S et de monomère Q_M, qui sont limités dans leur amplitude. Ce problème d'optimisation multivariable, qui doit permettre d'obtenir la distribution de tailles des particules prescrite bimodale à la fin de la réaction de polymérisation, est formulé en tant que

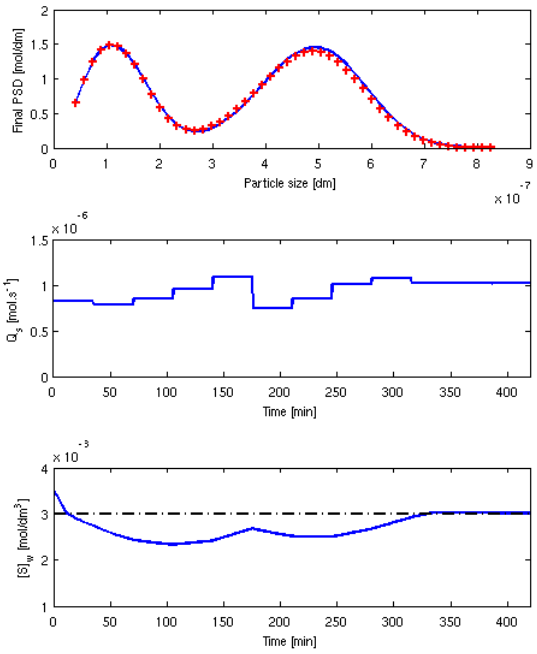

FIGURE 4.10 – Optimisation hors ligne : distribution de tailles des particules finale (haut + : cible, haut continue : solution optimale trouvée), débit optimal de tensioactif trouvé (milieu) et concentration optimale de tensioactif libre trouvée (bas continu) avec CMC (bas trait-point).

problème de commande prédictive.
Les résultats des commandes prédictive avec modèle linéarisé et modèle initial non linéaire sont assez comparables en termes de performances en ligne et de distribution de tailles des particules finales [ARIACLS2] [18] . Toutefois, dans l'approche non linéaire, il faut 8 fois plus de temps de calcul pour trouver la solution qu'avec le linéarisé. En termes de norme de la fonction objectif, elle est supérieure de 7% (donc moins précis) dans l'approche linéarisée que dans l'approche non linéaire. Compte tenu de la tâche de calcul et des résultats de l'optimisation, on peut conclure que l'utilisation de la commande prédictive non linéaire n'est pas justifiée ici. Par conséquent, seuls les résultats avec modèle linéarisé sont discutés dans les simulations suivantes.
Parmi les résultats disponibles, ceux issus de simulation avec une erreur de paramètre du modèle a_{sp} (son efficacité à stabiliser les particules change alors) sont présentés dans cette section : ce paramètre représente la surface des particules qu'une molécule de tensioactif peut couvrir. Cette incertitude peut venir d'impuretés ou du stockage de tensioactif avant utilisation, car l'agrégation de ces molécules peut alors se produire, ce qui affecte directement a_{sp}. Dans un premier essai, une erreur de

18. Publication personnelle : référence complète dans la partie CV (2.7).

10% est introduite dans ce paramètre (par rapport à la valeur réelle simulée) et dans un deuxième essai, elle est portée à 50%. L'impact de cette incertitude sur la concentration de tensioactif libre dans la phase aqueuse et sur la concentration en monomères peut être vu sur les figures 4.11 et 4.12, pour la sortie du procédé et la sortie du modèle utilisée pour la prédiction.

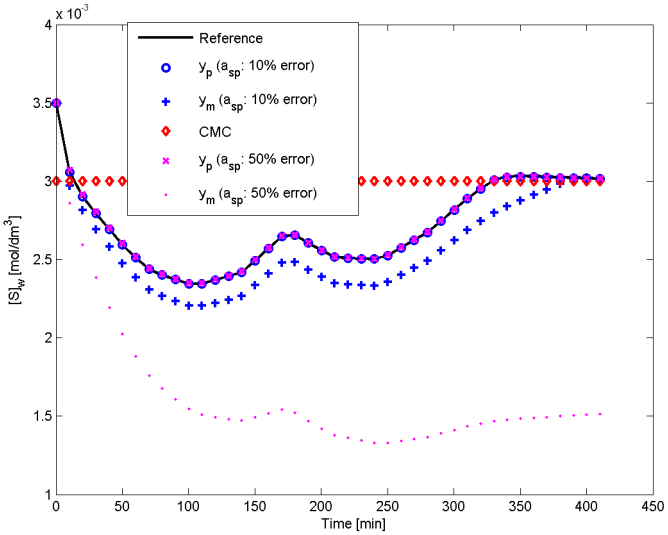

FIGURE 4.11 – Sortie avec incertitude (10% et 50%) : trajectoire de référence, réponses du modèle de prédiction, réponses du procédé en boucle fermée (le tout en termes de concentration en tensioactif libre).

Pour la réponse du modèle de prédiction (en boucle ouverte), la concentration calculée de tensioactif libre est fortement affectée par l'erreur sur a_{sp} (à la fin du test, la concentration de tensioactif libre est de 50% inférieure par rapport au cas sans erreur). En effet, si la valeur de a_{sp} utilisée dans le modèle est supérieure à sa valeur réelle, les particules y adsorbent plus de tensioactif que prévu ce qui réduit la quantité de tensioactif libre (Fig. 4.11). La concentration calculée de monomère (Fig. 4.12) n'est, au contraire, presque pas affectée par cette erreur (à la fin de la course, la concentration $[M]_P$ est supérieure de 2,5% par rapport au cas sans erreur) ce qui n'est pas surprenant étant donné qu'il n'existe pas de relation directe entre a_{sp} et cette concentration de monomère. En conséquence, avec 50 % d'erreur sur a_{sp}, la distribution de tailles des particules finale modélisée est unimodale et est fortement éloignée de sa cible (Fig. 4.13). En effet, dans ce cas, la concentration de tensioactif libre modélisé ne dépasse pas la CMC une deuxième fois afin de produire la deuxième population.
Pour le procédé (en boucle fermée), au contraire, la distribution de tailles des particules est proche de celle, bimodale, voulue et ce malgré cette incertitude sur a_{sp}, et même si la conduite est basée sur un modèle prédisant une distribution de tailles des particules monomodale (Fig. 4.13). Cela est dû au fait que les 2 sorties pilotées respectent très bien leur comportement cible respectif (Fig. 4.11 et Fig. 4.12). En

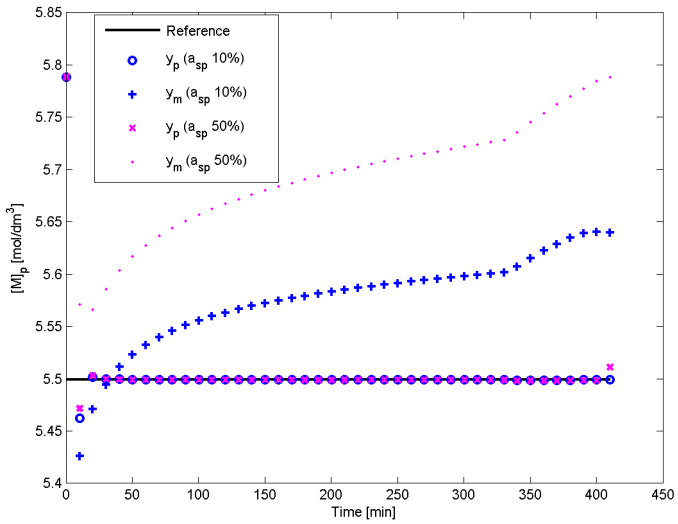

FIGURE 4.12 – Sortie avec incertitude (10% et 50%) : consigne, réponses du modèle de prédiction, réponses du procédé en boucle fermée (le tout en termes de concentration en monomère).

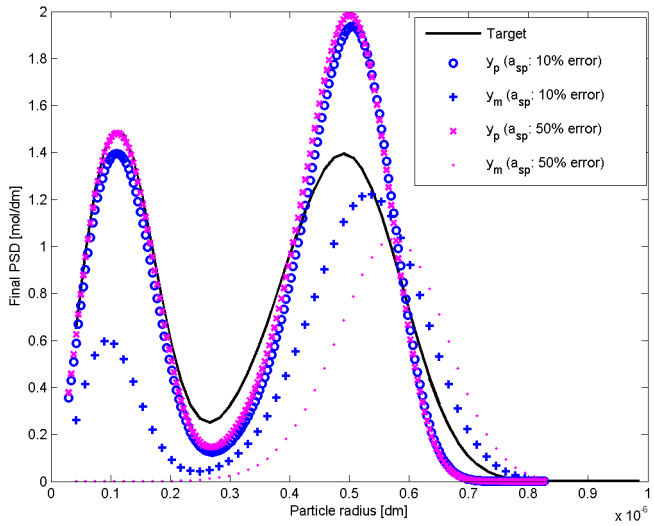

FIGURE 4.13 – Sortie avec incertitude (10% et 50%) : cible, réponses du modèle de prédiction, réponses du procédé en boucle fermée (le tout en termes de distribution de tailles des particules finale).

termes d'actions de commande (Fig. 4.14), le débit de tensioactif est beaucoup plus touché par ces incertitudes (jusqu'à 20%) que le débit de monomère (presque pas de différence).
Tous ces résultats soulignent la robustesse de la commande. Il peut être conclu que

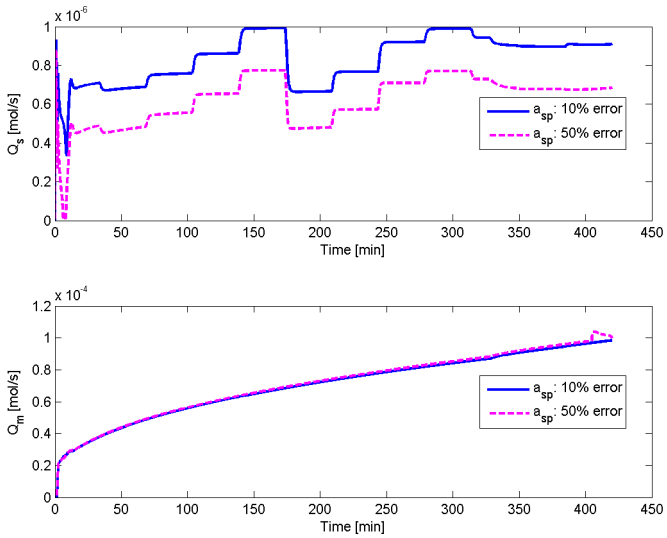

FIGURE 4.14 – Commandes en boucle fermée avec incertitude (10% et 50%) : débit de tensioactif et débit de monomère.

la synthèse d'un contrôleur optimal, en boucle ouverte et en supposant la modélisation parfaite, conduirait à des erreurs importantes entre les distributions de tailles des particules souhaitées et réelles, à cause des impuretés ou des changements dans les matières premières. La commande prédictive multivariable en boucle fermée à modèle linéarisé est donc nécessaire afin d'obtenir un distribution de tailles des particules finale cible pour un polymère.

4.4.4 Conclusion

Dans ce travail, une nouvelle stratégie de contrôle d'un réacteur de polymérisation en émulsion par inférence, en 2 étapes et fondée sur un modèle de la distribution de tailles des particules, a été développée. Deux mesures ont été utilisées en ligne à des fins de conduite : la concentration du monomère par calorimétrie et la concentration en tensioactif en phase aqueuse par conductimétrie. La première limitation peut être que la conductimétrie n'a été validée expérimentalement que sur les systèmes à faible teneur en matières solides. La conductimétrie peut encore être appliquée à des systèmes de haute teneur en matières solides, si une boucle de circulation et de dilution est ajoutée. En attendant, il convient de rappeler que la mesure directe en ligne de la distribution de tailles des particules n'est pas disponible et, par conséquent, la conductimétrie représente une bonne alternative. En outre, les capteurs de mesure de la distribution de tailles des particules sont beaucoup plus coûteux qu'un conductimètre, ce qui dissuade de leur installation pour le suivi en ligne dans l'industrie. Il est à noter que les travaux traitant de contrôle direct de la distribution de tailles des particules (basée sur sa mesure en ligne) sont principalement des études de simulation.

Ici, une stratégie de commande à 2 étapes pour le contrôle de polymérisation en émulsion en utilisant la commande prédictive a été construite comme suit. Dans la première étape, la trajectoire de concentration en tensioactif libre optimale a été pré-calculée, par l'optimisation à base de modèle, afin d'obtenir une distribution de tailles des particules cible bimodale. Dans la deuxième étape, une commande prédictive multivariable a été appliquée en ligne pour d'une part suivre la trajectoire pré-calculée de la concentration en tensioactif libre et d'autre part pour maximiser la concentration du monomère dans les particules de polymère par une régulation sous contraintes près de la valeur de saturation (c'est à dire en restant en dessous de cette valeur de saturation). Les deux débits de monomères et de tensioactif ont été manipulés en ligne. Basée sur un modèle, la stratégie est cependant tributaire de la qualité du modèle. Par exemple, la valeur de la CMC doit être connue. Ce paramètre est toutefois généralement bien connu, et il évolue légèrement avec le temps pendant le stockage du tensioactif. La stratégie de commande a été validée en présence d'importantes incertitudes sur un paramètre important du modèle (la surface des particules couverte par une molécule de tensioactif). La distribution de tailles des particules finale obtenue en boucle fermée est proche de celle prescrite. La comparaison entre les stratégies linéarisé et non linéaire a montré que l'approche à modèle linéarisé aide à diminuer le temps de calcul d'un facteur 8, tandis que la dégradation des performances est inférieure à 7%. L'approche linéarisée peut donc être mise en oeuvre avec un court temps d'échantillonnage ($10s$), ce qui n'est pas le cas pour le contrôleur non linéaire. En outre, l'optimisation en utilisant un modèle non linéaire n'est pas toujours évidente et peut ne pas converger correctement. Il convient cependant de noter que le temps de développement d'une stratégie de commande fondée sur le modèle non linéaire est ici plus simple par rapport à la stratégie basée sur le modèle linéarisé.
Ce travail a donné lieu à 2 communications à des congrès internationaux avec comité de sélection et actes [CIACSAA16, CIACSAA14] [19] . 1 publication dans une revue internationale à comité de lecture a été soumise à l'automne 2010 [ARIACLS2] [20] .
Bruno Da Silva est en poste depuis mars 2009 dans l'industrie en France (ECOREN, société issue de l'IFP).

4.5 Thèse (ADEME, EDF, Dupont, Philipps, LAGEP) de Bombard : procédé de cuisson de peintures en poudre

4.5.1 Introduction

Dans le cadre de la thèse de doctorat en génie des procédés d'Isabelle Bombard à laquelle j'ai participé (néanmoins sans être encadrant officiel), j'ai pu valider de

19. Publication personnelle : référence complète dans la partie CV (2.7).
20. Publication personnelle : référence complète dans la partie CV (2.7).

façon expérimentale certaines de mes idées sur la commande prédictive. Cela concernait un procédé de cuisson de peintures en poudre sur un support plan et métallique sous infrarouge. Cette thèse de l'UCBL1, qui s'est faite au LAGEP, avait pour titre "Modélisation expérimentale et théorique de la cuisson de peintures en poudre". Ce travail se situait dans une collaboration entre P. Laurent, spécialiste en transfert thermique et J. Lieto (tout deux du LAGEP en section 62 "Génie des Procédés") d'une part, et l'ADEME, EDF, Philips Éclairage et Dupont Coatings d'autre part. J'ai participé à ces travaux de mai 2006 à novembre 2007, pour la partie automatique. Cela a été aussi l'occasion pour moi d'encadrer un stage de master recherche (Kamel Abid).
L'objectif principal, pour la partie automatique (20 % de la thèse), était d'étudier les possibilités d'utiliser dans une approche de commande prédictive un modèle fondamental développé pendant cette thèse. Le modèle était à équations non linéaires, à dérivées partielles, à commande et mesure frontières. Il s'agissait ensuite de voir comment traduire un objectif sur une caractéristique cible liée au produit final en un objectif de conduite pendant le cycle de production. La commande se devait d'être robuste car des phénomènes importants (des perturbations non mesurées dépendant de la commande) ne sont pas mesurables en ligne.

4.5.2 Commande : objectifs et modèle

Pour la partie automatique, l'objectif de ce travail était de montrer la robustesse d'une loi de commande prédictive en temps réel d'un procédé de cuisson de peintures en poudre sur un support plan et métallique sous infrarouge (Fig. 4.15).

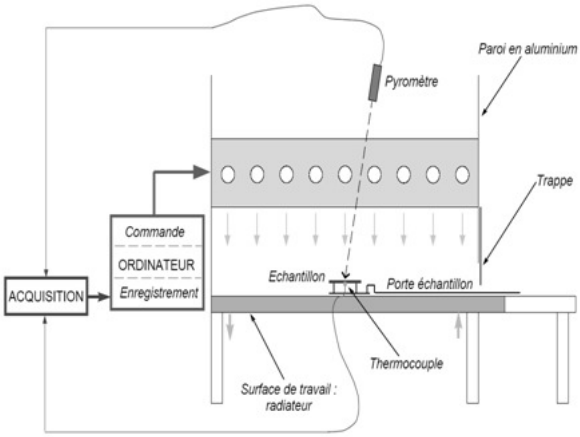

FIGURE 4.15 – Schéma de principe du procédé pilote de cuisson de peintures en poudre.

La loi de commande est basée sur un modèle de connaissance, aux équations aux dérivées partielles et à commande frontière, cependant non parfait. Cela est dû à des propriétés radiatives de l'émetteur, complexes à modéliser et à mesurer en ligne.

L'objectif est ici d'employer la commande prédictive et d'utiliser la possibilité qu'elle confère de travailler avec des trajectoires de cuisson précises pour étudier l'influence des conditions de cuisson dans le four sur l'aspect de surface et sur la rugosité du revêtement final réticulé. La commande est utilisée au final pour suivre un cycle de cuisson voulu afin d'obtenir par inférence un film de qualité souhaitée. La cuisson des peintures en poudre est régie par les lois de transferts de chaleur (via les flux ϕ), basées sur les phénomènes représentés sur la figure 4.16 :

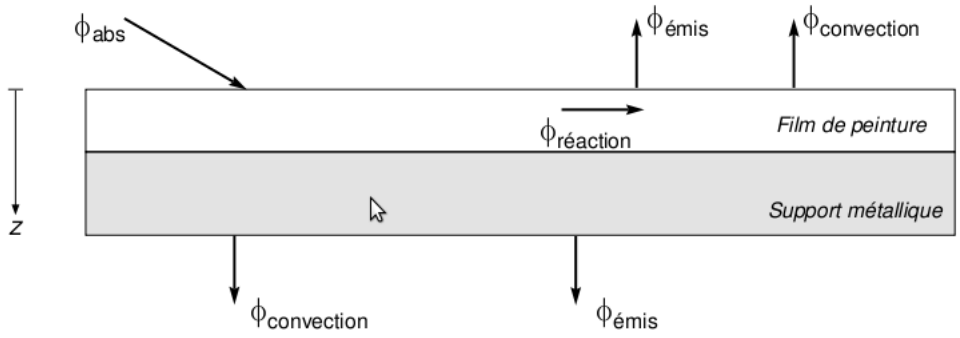

FIGURE 4.16 – Schéma de l'échantillon de peinture déposé sur son support.

Le modèle de transferts thermiques 1D consiste ainsi à intégrer numériquement l'équation de la chaleur écrite, dans chacun des milieux (support et peinture), sous la forme :

$$\begin{cases} \rho_p Cp_p \frac{\partial T_p}{\partial t}(z,t) = \nabla\left(\lambda_{c,p}\nabla T_p\right) - \rho_p e_p \Delta H_0 \frac{dx}{dt}(z,t) & \forall 0 < z < e_p, t > 0 \\ \rho_s Cp_s \frac{\partial T_s}{\partial t}(z,t) = \nabla\left(\lambda_{c,s}\nabla T_s\right) & \forall e_p < z < e_p + e_s, t > 0 \end{cases} \tag{4.23}$$

où t est le temps, z la variable d'espace, T la température, ρ est la masse volumique, C_p est la chaleur spécifique, λ_c est la conductivité thermique et où les indices p et s correspondent à la peinture et au support respectivement. e_p représente l'épaisseur de la couche de peinture et ΔH_0 l'enthalpie de la réaction de polymérisation. Le terme de chaleur de réaction représente donc le couplage entre les modèles thermique et cinétique et correspond à la chaleur dégagée par la réaction exothermique de polymérisation (dont la dynamique est bien plus lente que la dynamique thermique). De nombreux modèles cinétiques ont été cités dans la littérature. La cinétique de cuisson des poudres employées est ainsi décrite par le modèle de Sesták-Berggren ([36]).

$$\frac{dx}{dt}(z,t) = k(T(z,t))f(x(z,t)) \qquad \text{avec} \begin{cases} k(T(z,t)) = A\exp\left(\frac{-E}{RT(z,t)}\right) \\ f(x(z,t)) = x(z,t)^m(1-x(z,t))^n \end{cases} \tag{4.24}$$

où x est le degré de conversion, $k(T)$ est la constante de vitesse d'Arrhenius, A est le facteur pré-exponentiel, E est l'énergie d'activation, R est la constante des gaz parfaits, et $f(x)$ est la fonction différentielle de la conversion.
Avant la mise en route de l'émetteur infra-rouge, le système "support+échantillon" est à température ambiante et la réaction de polymérisation n'a pas commencé :

$$\begin{cases} T_p\,(z,0) = T_{amb}\ \forall 0 \leq z \leq e_p \\ T_s\,(z,0) = T_{amb}\ \forall e_p < z \leq e_p + e_s \\ x\,(z,0) = 0^+ \quad \forall 0 \leq z \leq e_p \end{cases} \tag{4.25}$$

Les 3 conditions aux limites sont les suivantes :

◇ Pour $z = 0,\ t > 0$, à la surface supérieure du film de peinture :

$$\begin{cases} \phi_{abs}(t) = \alpha_p(.)\phi_i(t) \\ -\lambda_{c,p}\frac{\partial T_p}{\partial z}(z,t) = \phi_{abs}(t) - \epsilon_p(.)\sigma\left(T_p^4(z,t) - T_{\infty,sup}^4\right) - h_p\left(T_p(z,t) - T_{\infty,sup}\right) \end{cases} \tag{4.26}$$

où h_p est le coefficient d'échange convectif de la peinture, ϕ_{abs} représente le flux absorbé par le système " support + peinture" et α_p est le coefficient d'absorptivité de la peinture (qui sera un paramètre central dans cette étude). La température T_∞ représente la température du milieu environnant et $\phi_i(t)$ est la commande à manipuler à la frontière. On note $T_{surf}(t) = T_p(0,t)$.

◇ Pour $z = z_{interface} = e_p,\ t > 0$, à l'interface peinture-support :

Comme énoncé dans la présentation du modèle, le contact entre la peinture et le support est supposé parfait ; aucune résistance au transfert thermique n'est considérée et il y a continuité des températures et des flux de chaleur à l'interface peinture-support.

$$-\lambda_{c,p}\frac{\partial T_p}{\partial z}(z,t) = -\lambda_{c,s}\frac{\partial T_s}{\partial z}(z,t) \quad et \quad T_p(z,t) = T_s(z,t) \tag{4.27}$$

◇ Pour $z = e_p + e_s$, à la surface inférieure du support :

$$-\lambda_{c,s}\frac{\partial T_s}{\partial z}(z,t) = h_s(T_s(z,t) - T_{\infty,inf}) + \mathcal{F}_{1\to2}^g\sigma(T_s^4(z,t) - T_{\infty,inf}^4) + \mathcal{F}_{1\to3}^g\sigma(T_s^4(z,t) - T_{init,inf}^4) \tag{4.28}$$

où h_s est le coefficient d'échange convectif du support.

L'une des difficultés majeures dans la modélisation est ici de pouvoir connaitre précisément la valeurs des paramètres α_p et ϵ_p intervenant dans les effets radiatifs. En effet, ces 2 paramètres ne sont en fait pas constants car fondamentalement, α_p dépend, entre autres, de la commande $\phi_i(t)$ et ϵ_p dépend de $T_{surf}(t)$ (donc aussi

entre autres de la commande $\phi_i(t)$). Pour la modélisation, la difficulté est plus un manque de mesures pour estimer ces paramètres qu'un manque de connaissances. En effet, soient :

1. $ir(\lambda)$ l'irradiance spectrale des lampes infrarouges (mesures fournies par le constructeur),
2. $\rho_{p,\lambda,T_{surf}(t)}$ la réflectance spectrale des peintures mesurée à la surface $z = 0$ par spectrométrie infrarouge FTIR entre $1.4\mu m$ et $12.4\mu m$ pendant la cuisson des peintures.

Pour obtenir l'absorptivité de la peinture $\alpha_{p,T_{surf}(t)}$ et l'émissivité spectrale de la peinture $\epsilon_{p,T_{surf}(t)}$, il a été fait l'hypothèse que la peinture est opaque : $\rho_{p,\lambda,T_{surf}(t)} + \alpha_{p,\lambda,T_{surf}(t)} = 1$ et $\alpha_{p,\lambda,T_{surf}(t)} = \epsilon_{p,\lambda,T_{surf}(t)}$. On obtient alors :

$$\alpha_{p,T_{surf}(t)} = \left\{ \int_0^\infty \mathrm{i}(\lambda)\alpha_{p,\lambda,T_{surf}(t)} d\lambda \right\} \cdot \frac{1}{\int_0^\infty \mathrm{i}(\lambda) d\lambda} \tag{4.29}$$

Ce coefficient dépend donc de la longueur d'onde des lampes infrarouges, qui est directement reliée à la commande appliquée $\phi_i(t)$, qui sera très probablement temps variant en boucle fermée. Dans le cas où la commande varie pendant l'expérience, il n'est cependant pas possible d'avoir à disposition en permanence les appareils de mesure et la thèse de Bombard [2] a permis de montrer le fort impact de cette incertitude sur les températures. Le flux émis par la peinture du fait de sa température de surface $T_{surf}(t)$ est :

$$\phi_{émis(t)} = \int_0^\infty \epsilon_{p,\,\lambda,T_{surf}(t)} \frac{C_1 \lambda^{-5}}{\exp(\frac{C_2}{\lambda T_{surf}(t)}) - 1} d\lambda = \epsilon_{p,T_{surf}(t)} \sigma T_{surf}^4(t) \tag{4.30}$$

A une température $T_{surf}(t)$, l'expression de l'émissivité moyenne sur le spectre (ϵ_p) se déduit directement de la relation précédente. Dans le cas où $\phi_i(t)$ varie pendant l'expérience, il n'est cependant pas possible de réaliser de telles mesures en permanence. Dans le calcul du bilan thermique, il faut donc prendre en compte le fait que les émissivités et absorptivités sont en réalité des variables qui changent à chaque température de cuisson (donc fonction de la commande ϕ_i, et en fonction de la longueur d'onde de l'émetteur, donc à nouveau selon la commande ϕ_i). La difficulté est donc qu'aujourd'hui, il n'est pas possible de modéliser la longueur d'onde en fonction de la commande ϕ_i, notamment par manque de mesures en ligne dans les lampes elles-mêmes. Ces paramètres sont donc considérés constants dans le modèle, et le choix de ces valeurs est ouvert a priori.
Au bilan, ce modèle comporte 1 commande ϕ_i qui irradie la surface supérieure et 1 sortie mesurée à contrôler qui est la température de la surface inférieure. Le modèle est aux équations aux dérivées partielles, non linéaires, et à commande et mesure frontières.

4.5.3 Commande : résultats

4.5.3.1 Influence du réglage de l'horizon de prédiction sur la qualité de la poursuite

La validation expérimentale a tout d'abord permis de souligner le problème classique du choix de l'horizon de prédiction, qui est le principal paramètre de réglage de la commande prédictive. Un horizon de prédiction trop faible risque de moins prendre en compte le futur comportement du procédé tandis qu'un trop grand horizon de prédiction nécessite un plus grand temps de calcul et introduit plus d'erreurs de modèle. Un horizon intermédiaire de 6 (avec une période d'échantillonnage de $1s$) donne ici le meilleur compromis en termes d'erreur de poursuite (Fig. 4.17), dû à un réglage moins agressif de la commande (Fig. 4.18). Ces expériences réalisées ont donc mis en évidence la faisabilité de ce type de commande pour la poursuite de trajectoire. Ceci permet donc de dire que pour une trajectoire de référence fixée, il est possible d'en réaliser la poursuite (sous réserve qu'elle soit physiquement admissible) [CIACSAA11] [21] .

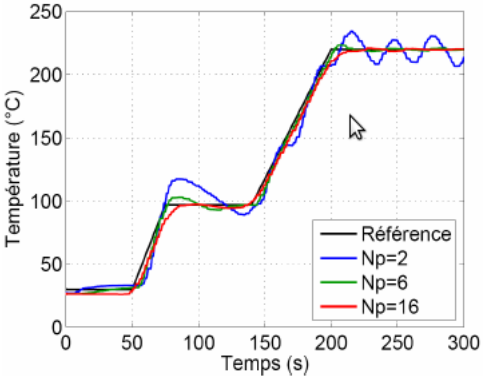

FIGURE 4.17 – Poursuite expérimentale de trajectoire de température (face inférieure) : sortie, pour divers réglages de l'horizon de prédiction.

4.5.3.2 Influence de l'incertitude paramétrique sur la qualité finale de la peinture

Par ailleurs, l'impact, et sa réduction, de la principale incertitude paramétrique sur les résultats de poursuite de trajectoire a été montrée expérimentalement. A partir de mesures expérimentales du coefficient d'absorption α_p (en fonction de la température des peintures) faites précédemment, il avait été validé que celui-ci est en fait dépendant de la commande [2] et a le plus d'impact sur la sortie. Cependant, cette variation n'est pas pris en compte dans le modèle dans la loi de commande, car très complexe à modéliser et sans mesure en ligne disponible.

21. Publication personnelle : référence complète dans la partie CV (2.7).

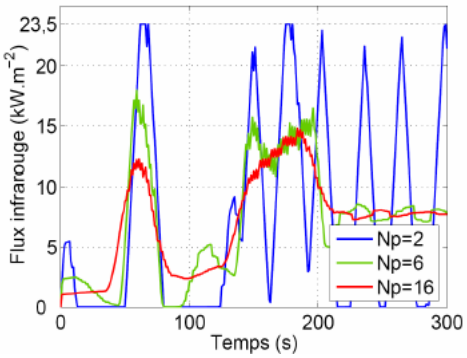

FIGURE 4.18 – Poursuite expérimentale de trajectoire de température (face inférieure) : commande, pour divers réglages de l'horizon de prédiction.

Une nouvelle étude [ARIACL11,CNACSAA02] [22] a donc été conduite pour : différents horizons de prédiction, deux couleurs réelles de peinture (blanche et noire), avec 3 valeurs constantes et différentes pour le coefficient d'absorption α_p utilisé dans le modèle de prédiction. Nous avons retenu les valeurs constantes mesurées pour la peinture blanche et la peinture noire (pour un émetteur à pleine puissance fonctionnant comme un corps noir, car nous ne disposons pas d'étude du comportement radiatif de l'émetteur avec entrée dynamique [2])), le "modèle moyen" utilise la moyenne des deux valeurs précédentes. Ceci représente l'incertitude paramétrique principale dont l'impact doit être atténué par la loi de commande en boucle fermée. La variable mesurée est la température mesurée sous l'échantillon, avec une incertitude de 1K. Pour comparer ces résultats (Fig. 4.19), nous avons utilisé la racine carrée de l'erreur quadratique moyenne (RCEQM) calculée sur toute la durée de l'expérience : la RCEQM de la poursuite de trajectoire (RCEQMP) qui représente la RCEQM entre la référence contrainte et la sortie du procédé, la RCEQM de modélisation (RCEQMM) qui représente la RCEQM entre la sortie du procédé et la sortie du modèle. Selon la RCEQMP, la commande est plus robuste pour la peinture noire que pour la peinture blanche, puisque l'incertitude du coefficient d'absorption a moins d'impact dans la boucle fermée pour la peinture noire que pour la peinture blanche. En effet, pour la peinture blanche, entre les pire et meilleur cas, la RCEQMM va de 10 à 80 K, tandis que la RCEQMP va de 3 à 10 K. Comparativement, pour la peinture noire, entre les pire et meilleur cas, la RCEQMM va de 15 à 45K, tandis que la RCEQMP va de 3 à 5 K. La moyenne de toutes les RCEQMM pour la peinture blanche est d'environ 6 K, et est de 4 K pour la peinture noire. Il faut rappeler que d'un côté, le contrôleur en boucle fermée peut être considéré comme la source de la perturbation dans le modèle calculé dans la fenêtre de prédiction. D'un autre côté, en dépit de la RCEQMM, ce contrôleur est encore suffisamment robuste pour régler le flux infrarouge de sorte que la poursuite soit bonne.
Par ailleurs, suivant les résultats obtenus avec la peinture noire, on peut conclure que le réglage du coefficient d'absorption de peinture nécessaire dans le modèle ne peut

22. Publication personnelle : référence complète dans la partie CV (2.7).

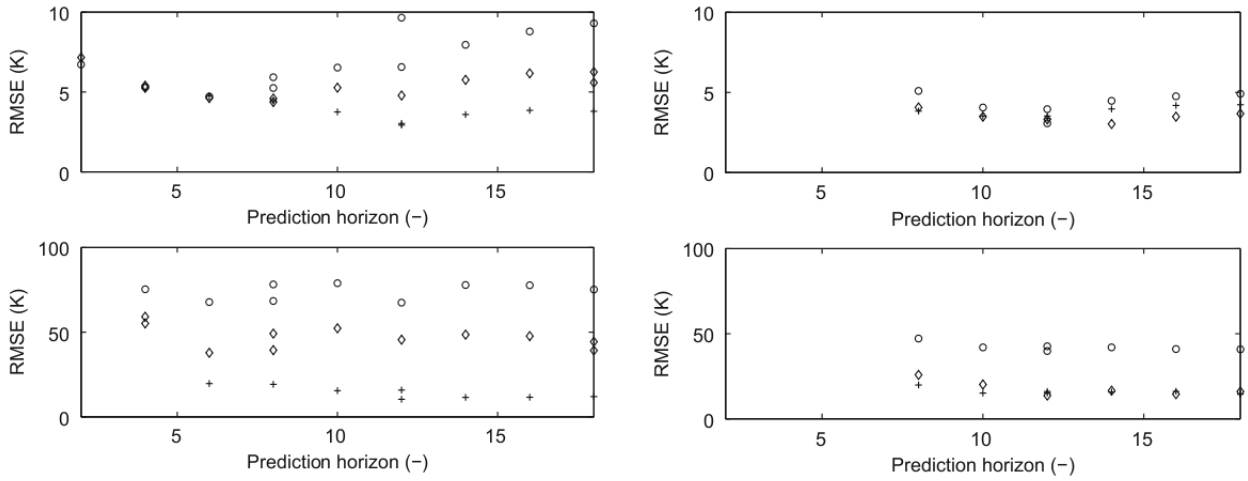

FIGURE 4.19 – Poursuite expérimentale de trajectoire de température (face inférieure) : influence, sur l'erreur de poursuite RCEQMP (en haut) et de l'erreur de modélisation RCEQMM (en bas) de : la couleur réelle de la peinture (blanche (gauche) et noire (droite)), de la valeur du paramètre α_p modélisé (noir (o), moyen($\diamond$), blanc (+)) et de l'horizon de prédiction.

donc pas être fait a priori sur la base des valeurs constantes obtenues hors ligne et donc sur la connaissance de la couleur de la peinture. En effet, comme le flux infrarouge appliqué dans la boucle fermée est dépendant du temps, il a un grand impact sur la valeur du coefficient d'absorption réel variable de la peinture. Cependant, ceci est moins évident pour la peinture blanche, puisque les meilleurs résultats y sont obtenus avec le modèle blanc. Si une autre couleur avait été utilisée, le problème serait de choisir cette valeur a priori. Afin d'améliorer le suivi, il serait donc d'un grand intérêt d'utiliser des techniques d'observateur pour estimer en ligne la valeur temps variant du coefficient d'absorption. Cette estimation pourrait alors alimenter en ligne la commande (une entrée de perturbation mesurée) et serait d'un grand intérêt pour cuire une peinture de n'importe quelle couleur, sans avoir à connaitre expérimentalement a priori la valeur du coefficient d'absorption de la peinture dans le modèle.

4.5.3.3 Influence du choix de la trajectoire de référence sur la qualité finale de la peinture

Comme on a vu qu'une trajectoire de référence fixée a priori peut être réellement suivie, nous allons voir comment celle-ci impacte la qualité finale de la peinture (le gloss), qui ne peut être mesurée qu'après la cuisson. Le tableau 4.20 regroupe les résultats de trois expériences réalisées suivant les trajectoires de référence de la Fig. 4.21 pour cuire une peinture noire. Ces résultats [CNACSAA01] [23] montrent que la rampe de cuisson et la température maximale ont une influence sur la brillance

23. Publication personnelle : référence complète dans la partie CV (2.7).

Cuisson	1	2	3
Rampe (°C.s-1)	4,03	4,03	0,5
Tmax (°C)	190	220	220
xmax (-)	0,9909	0,9998	0,9996
Épaisseur (μm)	0-50	41-70	67-92
Gloss à $60 \deg C$	40+/-1,5	29+/-1	40,5+/-0,5

FIGURE 4.20 – Évolution de la qualité finale (gloss) du film de peinture noire selon la référence de cuisson choisie.

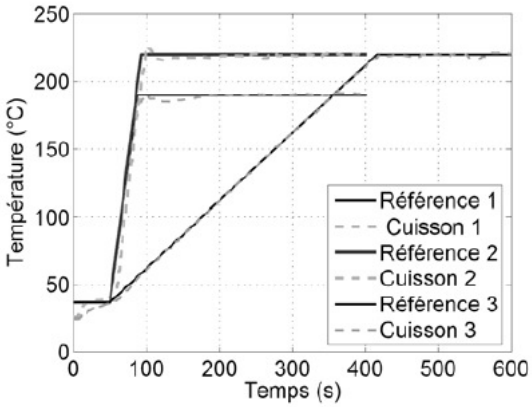

FIGURE 4.21 – Poursuite expérimentale de trajectoire de température (face inférieure) : sortie, pour diverses trajectoires de référence de cuisson.

finale du revêtement (mesurée avec un brillancemètre évaluant la quantité de lumière réfléchie lorsqu'on illumine le revêtement [2]) et par conséquent sur la structure de la surface du revêtement. Ainsi, la brillance nominale de la peinture noire se traduisant (d'après la norme retenue par le fabricant de peinture) par une mesure du Gloss à $60 \deg C$ de 30 (+/-5), il apparaît, en comparant les cuissons 1, 2 et 3 à degré de réticulation final x_{max} équivalent, que seule la cuisson suivant la rampe 2 permet de répondre à ce critère de qualité. Pour une rampe de montée en température moins rapide (3) ou pour une température maximale plus faible (1), ces essais montrent qu'on ne satisfait plus ce critère de qualité.
A partir de quelques essais, on peut donc caractériser, pour un indice de qualité d'usage (gloss), un cycle de cuisson. Ensuite, en production, il suffit de paramétrer dans la loi de commande prédictive le cycle de cuisson voulu lié à cette valeur du gloss. Cela permet, en conséquence, d'assurer une production uniforme.
Le problème suivant serait d'optimiser la trajectoire à suivre, pour une valeur cible du gloss, en termes de temps opératoire et/ou d'énergie nécessaire. Cependant, comme il n'y a pas de modèle dynamique existant reliant le modèle actuel au gloss, seuls des essais erreurs peuvent être réalisés à ce jour.

4.5.4 Conclusion

Pour les deux peintures considérées, l'utilisation d'une valeur constante, pour le coefficient d'absorption de la peinture dans la commande prédictive à modèle interne, conduit néanmoins à une certaine robustesse de la commande en boucle fermée du procédé de cuisson de peinture, en dépit du fait que le coefficient réel d'absorption de peinture est en fait une entrée de perturbation temps variant non mesurée (car fonction de la commande). Par conséquent, le contrôle en boucle fermée permet, grâce à la commande prédictive à modèle interne qui possède de façon intrinsèque des propriétés de robustesses intéressantes, d'atteindre les objectifs de commande fixés. Le cycle de cuisson d'une peinture, même avec une méconnaissance de certains des paramètres thermiques, peut donc être commandé en ligne par un contrôleur prédictif basé sur le modèle. Ce travail a aussi permis de montrer que le choix de la valeur du coefficient d'absorption nécessaire dans le modèle n'est pas si facile, même si on connait la couleur de la peinture. Enfin, on a vu qu'une propriété finale d'usage (le gloss) pouvait être contrôlée indirectement via une poursuite de trajectoire pendant la cuisson pour la température mesurée.
Une perspective intéressante concernerait l'évaluation de l'utilisation des techniques d'observateur pour estimer en ligne ce coefficient d'absorption temps variant. En injectant cette estimation en tant que perturbation d'entrée mesurée, ceci devrait permettre d'améliorer les résultats de poursuite.
Ce travail a donné lieu à 1 article de revue internationale avec comité de lecture [ARIACL11] [24] , 1 communication publiée lors d'un congrès international avec comité de sélection et actes [CIACSAA11] [25] , et 2 communications publiées lors de congrès nationaux avec comité de sélection et actes [CNACSAA02, CNACSAA01] [26] .
Isabelle Bombard est en poste depuis le printemps 2008 dans l'industrie au Canada (SOUTEX).

4.6 Post-doctorat (AUF, LAGEP) de Daraoui : procédé de lyophilisation de produits pharmaceutiques

4.6.1 Introduction

Ce stage post-doctoral à l'UCBL1, financé par l'AUF du 1er octobre 2006 au 30 juillet 2007, s'est déroulé au LAGEP et concernait la commande d'un lyophilisateur d'un produit pharmaceutique (un vaccin). Ce travail s'appuyait sur diverses expertises reconnues au LAGEP, dans des projets multidisciplinaires précédemment réalisés [27] sur ce sujet entre 2 équipes du LAGEP et l'Institut Polytechnique de Tu-

24. Publication personnelle : référence complète dans la partie CV (2.7).
25. Publication personnelle : référence complète dans la partie CV (2.7).
26. Publication personnelle : référence complète dans la partie CV (2.7).
27. Projet Européen Lyo-pro, G1RD-CT-2002-00736,"Optimization and control of the freeze-drying of pharmaceutical proteins."

rin (Italie).
L'objectif principal était d'étudier les possibilités d'utiliser dans une approche de commande prédictive un modèle fondamental développé précédemment. Le modèle était à équations non linéaires, à dérivées partielles et avec une frontière variable, à commande et mesure frontières. Il s'agissait d'évaluer en simulation divers objectifs de commande, notamment en termes d'optimisation des performances (diminution du temps opératoire) et ce malgré les incertitudes paramétriques.
J'ai co-encadré ce stage (65 %) avec le Prof. H. Hammouri.

4.6.2 Commande : objectifs et modèle

Le séchage est une opération qui vise à réduire la teneur en humidité à l'intérieur d'un produit, afin d'obtenir des produits déshydratés. Le séchage est l'une des plus anciennes opérations réalisées par l'homme. Aujourd'hui, 60 000 produits séchés et 100 types de séchoirs sont couramment utilisés dans le monde entier [28, 23] dans de nombreuses industries notamment : agriculture, biotechnologie, agroalimentaire, textile, minière, pharmaceutique, pâtes et papiers, polymère, bois etc.
D'un point de vue impact environnemental, les diverses techniques de séchage sont malheureusement grandes consommatrices d'énergie (de l'ordre de 10 à 25% de l'énergie mondiale utilisée) alors que la majorité des séchoirs industriels fonctionnent avec une faible efficacité énergétique, entre 10% et 60% (ce ratio est défini comme l'énergie théorique nécessaire pour le séchage à l'énergie réellement consommée).
Même si les techniques de commande automatisée sont assez largement utilisées depuis le milieu des années 1970 dans divers milieux industriels, leurs applications pour le séchage est encore relativement modeste. En effet, étant donné d'une part le grand nombre de séchoirs et de produits différents à sécher, et d'autre part la complexité des phénomènes de transport mis en jeu dans le séchage, aucun contrôleur unique ne peut être appliqué à tous les séchoirs. En outre, la plupart des travaux de recherche en séchage sont encore axés sur la compréhension des mécanismes de séchage et sur son impact sur la qualité du produit plutôt que sur le contrôle de l'opération elle-même. Par conséquent, il n'est pas surprenant de constater que relativement peu de travaux portent sur les aspects de contrôle automatisé dans le séchage [ARIACL09] [28] . Il faut noter que le principal coût en séchage n'est pas l'investissement initial, mais dans le quotidien pour l'opération, où le contrôle s'avère donc très important pour économiser l'énergie et pour obtenir la qualité souhaitée des produits. Par exemple [4], dans une usine de sucre de betterave, l'utilisation d'une commande prédictive a permis de réduire les coûts énergétiques de 1,2% (18.900 euros/an). Le rendement de l'opération a augmenté de 0,86%, pour une valeur de 61.600 euros/an et la production hors spécifications a diminué de 11% à 4%. Enfin, le retour sur investissement de cette stratégie (matériel et développement) a été de 17 mois.
La lyophilisation est une méthode de séchage utilisée fréquemment dans la biotechnologie, les industries alimentaires et pharmaceutiques [29]. Par rapport aux techniques

28. Publication personnelle : référence complète dans la partie CV (2.7).

classiques de séchage, la lyophilisation est généralement considérée pour la fabrication de produits séchés avec la plus haute qualité. Jusqu'à présent, une plus grande utilisation de la lyophilisation est limitée par son coût et son utilisation reste donc limitée pour les produits à forte valeur ajoutée, comme les produits pharmaceutiques. La principale raison du coût élevé de la lyophilisation est la nécessité d'opérer sous vide, ce qui implique un temps de traitement important. Pendant la 1ère phase de lyophilisation (séchage primaire), le paramètre le plus important à contrôler est la température à l'intérieur du produit. En termes de variables de contrôle, les réglages de la température et de la pression dans la chambre sont souvent établis de façon empirique hors ligne par essais-erreurs dans une approche expérimentale ou par un plan factoriel.
Le 1er objectif de ce travail en simulation était d'optimiser en ligne la procédure de lyophilisation, qui est de minimiser le temps de lyophilisation pour atteindre et rester en dessous d'une température limite fixée. Le 2nd objectif final, quant a lui, concernait la minimisation du temps opératoire tout en respectant les contraintes de qualité sur le produit final.
Le modèle utilisé ici est assez complexe, car il est décrit par des équations aux dérivées partielles et fortement non linéaires, avec une variable d'espace, et a une frontière variable. Dans cette étude, les modèles existants ont tout d'abord du être analysés et celui choisi reformulé afin d'avoir un modèle utilisable numériquement. Afin de diminuer la charge sur la ligne de calcul pour l'algorithme de commande basé sur un modèle, il est fait diverses hypothèses de modélisation, notamment :

- Il n'y a qu'une seule dimension spatiale z pour les bilans de chaleur et de transferts de masse.
- Le front de sublimation séparant les parties congelée et séchée est plan et parallèle à la section horizontale de la fiole du vaccin.
- La région glacée est considérée comme homogène.
- Les flux sur les parois sont négligeables.

Sur la base de toutes les hypothèses, le modèle mathématique se compose notamment du bilan thermique dans les régions séchée et congelée. Les équations dynamiques du modèle fondamental sont initialement :

$$\begin{cases} \frac{\partial T_1(z,t)}{\partial t} = \frac{k_{1e}(T_1(H(t),t))}{\rho_{1e}c_{p1}}\frac{\partial^2 T_1}{\partial z^2} - \frac{c_{pg}}{\rho_{1e}c_{p1}}\frac{\partial(N_w(T_1(H(t),t),H(t))T_1(z,t))}{\partial z} \\ \qquad -\frac{\Delta H_v \rho_1}{\rho_{1e}c_{p1}}k_d C_{sw}(z,t),\ 0 < z < H(t),\ t > 0, \\ \frac{\partial T_2(z,t)}{\partial t} = \frac{k_2}{\rho_2 c_{p2}}\frac{\partial^2 T_2}{\partial z^2},\ H(t) < z < L,\ t > 0 \\ \frac{dH(t)}{dt} = -\frac{1}{\rho_2 - \rho_1}N_w(T_1(H(t),t),H(t)),\ t > 0 \\ \frac{\partial C_{sw}(z,t)}{\partial t} = -k_d C_{sw}(z,t),\ 0 \leq z \leq H(t),\ t > 0 \end{cases} \tag{4.31}$$

où les deux variables indépendantes sont le temps t et l'espace z. L est la longueur de l'échantillon. L'état $x(z,t)$ est constitué de 4 composantes (dont 2 spatiales) : la température de la couche sèche $T_1(z,t)$, la température de la couche congelée $T_2(z,t)$, la position du front de sublimation $H(t)$, et la concentration de l'eau liée $C_{sw}(t)$. Les

paramètres du modèle qui ne dépendent pas de t ou z sont des valeurs constantes. Les significations et valeurs utilisées pour les paramètres du modèle peuvent être trouvées dans [19] et [ARIACL12] [29] .
Sur la base des équations de diffusion d'Evans, une version simplifiée du flux massique de vapeur d'eau $N_w(T_1(H,t),H(t))$, utilisé dans le modèle, est définie dans [25] :

$$N_w(T_1(H(t),t),H(t)) = -\frac{M_w k_1}{R_{ig} T_1(H(t),t) H(t)} \left(p_H(T_1(H(t),t) - p_0)\right), \; t > 0 \quad (4.32)$$

Cette expression dépend de 2 pressions partielles de vapeur d'eau :

- la pression à l'interface de sublimation $p_H(T_1(H(t),t))$ qui est définie comme la pression de vapeur d'équilibre en fonction de la température à cette interface mobile [6] :

$$p_H(T_1(H(t),t)) = \exp(B) \times \exp\left(\frac{-A}{T_1(H(t),t)}\right), \; t > 0 \quad (4.33)$$

- la pression p_0 en $z = 0$ qui est définie comme une pression constante à l'intérieur de la chambre. Elle peut également être utilisée comme une variable de commande. Ici, afin de simplifier cette 1^{ire} approche, une valeur constante lui est affectée ($10Nm^{-2}$).

Les conditions initiales sont les suivantes :

$$\begin{cases} T_1(z,t) = T_2(z,t) = T^o \;, \forall 0 \leq z \leq L \,, t = 0 \\ H(t) = 0^+ \;, t = 0 \\ C_{sw}(z,t) = C_{sw}^o \;, \forall 0 \leq z \leq L \,, t = 0 \end{cases}$$

Les conditions limites sont les suivantes :

$$\begin{cases} -k_{1e}(T_1(H(t),t))\frac{\partial T_1(z,t)}{\partial z} = \sigma F_{up}(T_{up}^4(t) - T_1^4(0,t)), \; z = 0, \; t > 0, \\ k_2 \frac{\partial T_2(z,t)}{\partial z} - k_{1e}(T_1(H(t),t))\frac{\partial T_1(z,t)}{\partial z} \\ = \left(-\Delta H_s - \frac{\rho_2 c_{p2} T_2(z,t) - \rho_1 c_{p1} T_1(z,t)}{\rho_2 - \rho_1}\right) N_w(T_1(H(t),t),H(t)), \; z = H(t), \; t > 0, \\ T_2(z,t) = T_1(z,t), \; z = H(t), \; t > 0, \\ -k_2 \frac{\partial T_2(z,t)}{\partial z} = (T_{lp}(t) - T_2(L,t)), \; z = L, \; t > 0 \end{cases} \quad (4.34)$$

La lyophilisation constitue donc un problème typique avec une frontière en mouvement : connaître la dynamique de l'interface de sublimation est en plus ici fondamental pour la prévision précise des phénomènes de lyophilisation. On peut aussi clairement constater que ce modèle aux équations aux dérivées partielles représente une formulation très fortement non-linéaire.
En ce qui concerne les incertitudes des paramètres du modèle, il est montré dans [19] que la capacité thermique de la couche gelée c_{p2} n'est pas connue avec précision, et change en fait en fonction de la température de commande : entre 240K et 260K,

29. Publication personnelle : référence complète dans la partie CV (2.7).

elle varie jusqu'à 50% autour de la valeur nominale. Ceci a un impact important sur la dynamique des variables d'état et cet effet doit donc aussi être minimisé en boucle fermée.
En termes de commande, l'entrée à régler en ligne est la température dans le lyophilisateur ($u(t) = T_{lp}(t) = T_{up}(t)$)) selon un des 2 problèmes de commande choisi :

1. soit la température mesurée en bas du flacon doit suivre un comportement désiré (ce qui n'est pas discuté ici mais l'est dans [CIACSAA12] [30]),
2. soit le temps opératoire doit être minimisé tout en obtenant un produit final utilisable (ce qui est discuté ici).

4.6.3 Commande : résultats

Pour comparer ces résultats, nous avons utilisé la racine carrée de l'erreur quadratique moyenne (RCEQM) calculée sur toute la durée de l'expérience. La RCEQM de la poursuite de trajectoire (RCEQMP) qui représente la RCEQM entre la référence et la sortie du procédé, la RCEQM de différence entre 2 simulations (RCEQME2S) qui représente la RCEQM entre 2 simulations assez similaires mais avec quelques réglages différents.

4.6.3.1 Analyse en boucle ouverte

Afin d'évaluer l'impact de l'incertitude de la valeur de la capacité thermique de la couche gelée c_{p2} sur la position du front de sublimation et sur de la température au fond du flacon, un courte étude en boucle ouverte est tout d'abord présentée. Elle est obtenue avec une valeur constante de la commande au cours de la lyophilisation. La figure 4.22 montre la position du front de sublimation et la température au fond du flacon pour la même valeur de contrôle en boucle ouverte (250,2 K), mais pour 3 différentes incertitudes de la capacité calorifique de la couche gelée.
Plus la valeur de cette capacité de chaleur est grande, plus la température est faible à un instant, augmentant ainsi le temps de la sublimation. Cette incertitude a donc un impact certain sur ces 2 caractéristiques importantes du séchage. Ces résultats sont résumés dans le tableau 4.23 : les variations du temps opératoire et de la RCEQME2S sont entre 0 et 10%. Cela nous dit que comme c_{p2} n'est pas bien connue, la vitesse de déplacement du front de sublimation et la température au fond du flacon changent, de même que la durée de l'étape de séchage primaire. Par conséquent, il peut être conclu que l'incertitude de ce paramètre a un impact fort sur ces deux sorties. Une commande en boucle fermée est donc nécessaire pour minimiser cet impact.

4.6.3.2 Minimisation sous contraintes du temps opératoire en boucle fermée

De 1ers résultats en boucle fermée ont permis de voir qu'un cycle de température de cuisson choisi pouvait être suivi via une poursuite de trajectoire [CIACSAA12] [31]

30. Publication personnelle : référence complète dans la partie CV (2.7).
31. Publication personnelle : référence complète dans la partie CV (2.7).

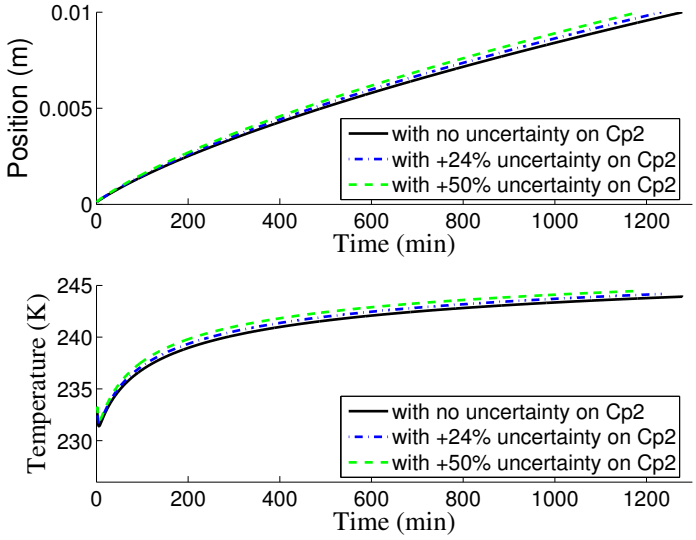

FIGURE 4.22 – Commande en boucle ouverte et impact de l'incertitude de la capacité thermique dans la couche gelée c_{p2} sur : la position du front de sublimation (en haut) et la température à la base du flacon (en bas).

Incertitude sur c_{p2} en %	RCEQME2S en %	Temps opératoire en *min* (% de variation par rapport au cas nominal)
0	0	1278 (0)
+24	2.9	1232 (-3.6)
+50	6.4	1182 (-7.5)

FIGURE 4.23 – Analyse des résultats en boucle ouverte.

Par inférence, la position du front est ainsi contrôlée. Afin de diminuer le temps opératoire, une seconde formulation de problème de commande prédictive est présentée ici : elle repose sur l'hypothèse de disponibilité de la mesure en ligne de la position du front de sublimation [39]. Cela permet un contrôle direct de la vitesse de ce front. Le problème de commande est formulé comme la maximisation de la vitesse de déplacement de ce front, tout en prenant compte d'une contrainte de température (afin d'avoir un produit final de qualité acceptable), et bien entendu des contraintes en amplitude sur la commande. La commande est utilisée jusqu'à ce que le front atteigne la base du flacon (signalant la fin des opérations).
La figure 4.24 représente l'évolution de la température de commande et la température contrôlée pendant le temps de séchage. Ces résultats [CIACSAA13,ARIACL12] [32] montrent un comportement similaire des sorties, en dépit de l'incertitude introduite dans la capacité thermique de la couche congelée. De même, l'optimisation de la vitesse du front de sublimation est efficace (en bas de la figure 4.25) et est presque identique dans les 3 cas. Par conséquent, par rapport au problème de suivi de tra-

32. Publication personnelle : référence complète dans la partie CV (2.7).

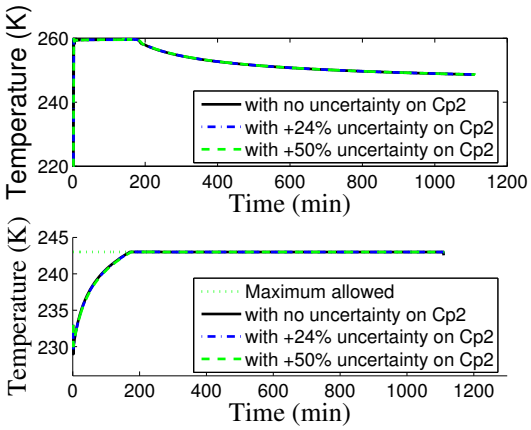

FIGURE 4.24 – Minimisation sous contraintes du temps de sublimation, sous diverses incertitudes sur c_{p2} : les températures de commande (en haut) et de sortie à la base du flacon (en bas)

.

jectoire, cette formulation de commande permet de diminuer la durée de l'étape de séchage primaire. En outre, la contrainte de sortie, qui est toujours satisfaite, limite la vitesse du front de sublimation quand elle devient saturée (environ dès 170 min). Ces résultats sont résumés dans le tableau 4.26 : les variations du temps opératoire, de la la vitesse moyenne du front de sublimation, de la RCEQME2S pour la température de sortie sont inférieures à 0,5%, ce qui souligne que les performances sont assez équivalentes malgré l'incertitude du paramètre. En outre, la résolution de ce problème de maximisation de vitesse sous contraintes, au lieu d'un problème de poursuite de trajectoire en boucle fermée, permet de diminuer le temps de la sublimation jusqu'à 7%. En ce sens, ce contrôleur en boucle fermée est robuste, et permet la minimisation du temps opératoire, tout en préservant les propriétés prescrites des produits.

4.6.4 Conclusion

Cette étude a abordé la commande prédictive via un modèle de connaissance de l'étape de séchage primaire du processus de lyophilisation. Le modèle aux équations aux dérivées partielles était fortement non linéaire, avec une frontière interne variable dont la vitesse de déplacement devait être contrôlée. L'objectif était de contrôler en ligne la position du front de sublimation (d'où le temps de séchage) afin d'obtenir des produits séchés de meilleure qualité et à moindre coût, en dépit d'une incertitude sur un paramètre important dans le modèle utilisé dans le contrôleur. En raison de l'absence de capteurs en ligne de position du front de sublimation, deux approches de contrôle en boucle fermée ont été proposées pour contrôler la position du front de sublimation. D'abord, un suivi de trajectoire de la température mesurée (en bas du flacon) a permis le contrôle par inférence de la position du front de sublimation non mesurée avec une précision de 1%, en dépit d'une incertitude importante de

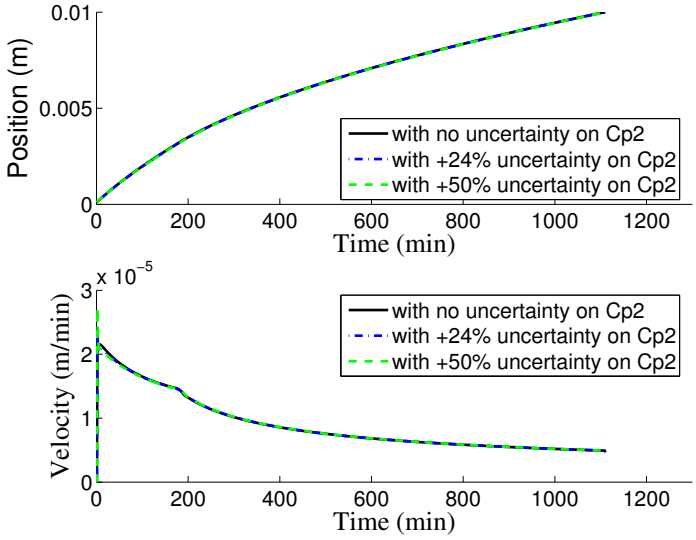

FIGURE 4.25 – Minimisation sous contraintes du temps de sublimation, sous diverses incertitudes sur c_{p2} : la position du front (en haut) et la vitesse du front (en bas)

.

Incertitude sur c_{p2} en %	RCEQME2S en %	Temps opératoire en min (% de variation par rapport au cas nominal)	Vitesse moyenne du front (m/min)
0	0	1109(0)	9.88 10^{-6} (0)
+24	0.26	1110 (+0.09)	9.86 10^{-6} (-0.2)
+50	0.50	1111 (+0.18)	9.84 10^{-6} (-0.4)

FIGURE 4.26 – Analyse des résultats en boucle fermée.

la valeur de la capacité calorifique à l'état congelé couche (+50%). Deuxièmement, une réduction directe du temps de sublimation a été montrée, toujours avec une précision de 1% malgré l'incertitude. Comparativement à l'approche de poursuite de trajectoire, l'approche par optimisation du temps opératoire a permis de réduire le temps de sublimation jusqu'à 7%, tout en gardant la température mesurée à l'intérieur d'une enveloppe prescrite (qui a permis de conserver les propriétés d'usage du produit). Par rapport à la boucle ouverte, les performances du procédé pourraient donc être améliorées, en dépit des approximations et les erreurs de modélisation introduites dans le modèle : la boucle fermée permet une répétabilité des expériences (ce qui est fondamental en production), même avec l'incertitude des paramètres du modèle.
Ce travail a donné lieu à 1 article de revue internationale avec comité de lecture [ARIACL12] [33] et à 3 communications publiées lors de congrès internationaux avec

33. Publication personnelle : référence complète dans la partie CV (2.7).

comité de sélection et avec actes [CIACSAA17, CIACSAA13, CIACSAA12] [34] .
Nawal Daraoui a poursuivi par un post doctorat (de septembre 2007 à mai 2008) au GIPSA Grenoble et est contractuelle depuis juin 2008 à l'UC3M, Espagne.

4.7 Thèse (Soubry, KUL (Belgique)) de De Temmerman : procédé de séchage de pâtes alimentaires

4.7.1 Introduction

Dans le cadre de la thèse de doctorat en génie des procédés de Jeroen de Temmerman, à laquelle j'ai participé (néanmoins sans être encadrant officiel), j'ai pu valider de façon expérimentale certaines de mes idées sur la commande prédictive. Cela concernait un procédé de séchage de pâtes alimentaires. Cette thèse de la Katholieke Universiteit Leuven (KUL), qui s'est faite à la division mécatronique, biostatistique et capteurs (MeBioS), avait pour titre "Development of a drying model for the moisture concentration in pasta with control design of the drying air properties". Ce travail se situait dans une collaboration entre le Prof H. Ramon (KUL), B. Nicolaï(KUL) et un industriel alimentaire belge (Soubry).
L'objectif principal de cette thèse était de développer un système de conduite basé sur un modèle, pour un séchoir de pâtes alimentaires, en adaptant en ligne les conditions opératoires (température et humidité) dans le séchoir.
J'ai participé à ces travaux de janvier 2007 à octobre 2008, pour la partie automatique, dans un cadre contractuel (via EZUS Lyon1) pour l'utilisation de mon logiciel MPC@CB.

4.7.2 Commande : objectifs et modèle

La thèse industrielle de Jeroen de Temmerman portait sur le séchage de pâtes alimentaires. Pour la partie automatique, il s'agissait, à partir d'un modèle fondamentale aux équations aux dérivées partielles développée dans cette thèse, d'assurer la commande prédictive en ligne sous contraintes du cycle de séchage. Le séchage est l'étape la plus cruciale dans le processus de production de pâtes alimentaire car elle détermine énormément la qualité finale du produit. Certains auteurs [12] ont montré comment la qualité finale des pâtes en fin de séchage a un lien avec des paramètres lors de la future préparation et dégustation finale tels que : le temps de cuisson (minimale, optimale et maximale), l'absorption d'eau pendant la cuisson, la texture des pâtes cuites (fermeté, mâche), la forme des pâtes, l'arôme et le goût. Le cycle de séchage a donc un effet important sur la qualité des pâtes séchées. Dans le même temps, ajuster les conditions de séchage n'est pas simple et ceci est souvent réalisé en mode manuel par essais-erreurs. La conduite d'un séchoir de pâtes alimentaires est donc souvent réalisée de manière empirique, fondée sur les connaissances

34. Publication personnelle : référence complète dans la partie CV (2.7).

pratiques des producteurs de pâtes, plutôt qu'en utilisant une approche d'ingénierie [ARIACL09] [35] .
L'objectif de contrôle de ce séchoir de pâtes consistait en un suivi de trajectoire pour la concentration moyenne d'humidité des pâtes. Elle est forcée de suivre une courbe de référence, qui est formulée dans l'industrie en fonction : de la qualité (les fissures ne sont pas autorisées, une couleur brune minimale est requise) et des limites juridiques (teneur en humidité maximale tolérée en fin de séchage). Ces données de référence sont fournies par une entreprise de pâtes industrielles (Soubry). Pour la suivre, l'idée était de développer un algorithme de conduite utilisant un modèle de connaissance développé pendant cette thèse. L'objectif de conduite est réalisé en réglant en ligne les entrées (température de l'air et l'humidité relative dans le séchoir).
Le séchage des pâtes alimentaires a été modélisé [10] avec un modèle de transfert de masse basé sur la loi de Fick. Le transport de l'humidité est supposé se faire sur une seule dimension, le long de l'épaisseur minimale des pâtes L. La surface de la pâte est entourée d'air avec 2 propriétés (température et humidité relative) sur la surface supérieure, pendant qu'elle est isolée avec une feuille d'aluminium sur la surface inférieure. Le rétrécissement de la pâte est inclus dans le modèle en le considérant comme un phénomène directionnel uniquement attribué à la perte d'humidité. La dynamique s'écrit donc :

$$\begin{cases} \frac{\partial X(z,t)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z}\left(\left(\frac{D(X(z,t),T_{air}(t))}{(1+\psi X)^2}\right)\frac{\partial X(z,t)}{\partial z}\right),\ 0 < z < L,\ t > 0, \\ D(X(z,t),T_{air}(t)) = a(T_{air}(t))\ \exp(bX(z,t)) \end{cases} \tag{4.35}$$

où les deux variables indépendantes sont le temps t et l'espace z. L est la longueur (fixe) de l'échantillon (car exprimé dans le repère lagrangien). L'état est $X(z,t)$ qui représente l'humidité en base sèche dans les pâtes, $D(X(z,t),T_{air}(t))$ est le coefficient de diffusion, ψ est le coefficient de retrait.
La condition initiale est :

$$X(z,t) = X^o \quad \forall 0 \leq z \leq L\,, t = 0 \tag{4.36}$$

Les conditions limites sont les suivantes :

$$\begin{cases} -\left(\frac{D(X(z,t),T_{air}(t))}{(1+\psi X)^2}\right)\frac{\partial X(z,t)}{\partial z} = \\ h_m(T_{air})(c(T_{air}(t),X(z,t)) - c_0(T_{air}(t),RH(t))),\ z = L(\text{face supérieure}),\ t > 0, \\ -\left(\frac{D(X(z,t),T_{air}(t))}{(1+\psi X)^2}\right)\frac{\partial X(z,t)}{\partial z} = 0,\ z = 0(\text{face inférieure}),\ t > 0, \end{cases} \tag{4.37}$$

La 1ère condition aux limites fait apparaitre les 2 commandes $u = [T_{air}(t)\ RH(t)]$. Le séchage de pâtes alimentaires est donc modélisé par un modèle aux équations aux dérivées partielles, avec 2 commandes frontières, à frontière temps variant et est fortement non-linéaire.

35. Publication personnelle : référence complète dans la partie CV (2.7).

4.7.3 Commande : résultats

La température de l'air est limitée entre 1 deg C et 100 deg C et l'humidité relative entre 1% et 100%. Le chauffage et le refroidissement sont limités à $1,5\,\text{deg}\,C/min$ et $-3\,\text{deg}\,C/min$, respectivement, tandis que la variation d'humidité relative est limitée à $+/-0,5\%HR/min$. Le temps d'échantillonnage a été fixé à $60s$ pour un temps opératoire de $5000s$. La concentration initiale en humidité moyenne de pâtes dans le modèle était supposé être de $47,7\%$. Les écarts ont été mis en place pour vérifier la pertinence et la robustesse du contrôleur : la concentration initiale en humidité moyenne du modèle a été fixée à $48,5\%$ (2 % d'erreur), tandis que le coefficient de diffusion du modèle de processus a été augmenté de $10,0\%$.
4 structures de commande ont été comparées à la commande en boucle ouverte : le PID et notre stratégie de commande prédictive, les deux en monovariable et en multivariable (Fig. 4.27 et 4.28).

- En boucle ouverte, 2 réglages ont été déterminés par essais-erreurs afin de rapprocher la mesure prêt de la trajectoire de référence. Ce réglage est assez empirique et mène à une erreur moyenne de poursuite de l'ordre de 4%.
- En boucle fermée monovariable, l'action de commande qui a le plus d'impact sur l'ensemble du séchage a été choisie (la température dans le séchoir) et l'humidité relative du séchoir reste constante durant tout le processus de séchage (HR = 10% est utilisé dans les simulations).
- L'utilisation du régulateur PID monovariable donne une erreur quadratique moyenne de 2,08%, ce qui est moins performant qu'avec un PID multivariable (1,98%). Utilisation d'un PID multivariable au lieu d'un PID monovariable contribue donc à diminuer de 5% l'erreur de poursuite. Par rapport à la boucle ouverte, cette erreur est divisée environ par 2.
- En commande prédictive monovariable, l'erreur moyenne entre l'humidité moyenne réelle du processus et le signal de référence est de 0,34%. Ceci est moins bien qu'avec la commande prédictive multivariable (0,29%). L'aide d'une commande prédictive multivariable au lieu d'une commande prédictive monovariable contribue donc à diminuer de 15% cette erreur. Cette erreur est divisée environ par 7 par rapport au PID, et par 14 par rapport à la boucle ouverte.

Le tableau 4.29 permet de résumer ces résultats. On voit que le système multivariable à commande prédictive est la meilleure structure de contrôle pour le procédé de séchage des pâtes et dans chaque cas, la commande prédictive donne de meilleurs résultats que le PID [ARIACL10] [36] . Par ailleurs, en termes d'entrées, la commande prédictive fournit des commandes plus douces que le PID, ce qui est plus intéressant pour les actionneurs.

4.7.4 Conclusion

Dans cette étude, un modèle à paramètre distribué non linéaire, à commandes frontières et à frontière variable a été utilisé pour la conduite d'un séchoir de pâtes

36. Publication personnelle : référence complète dans la partie CV (2.7).

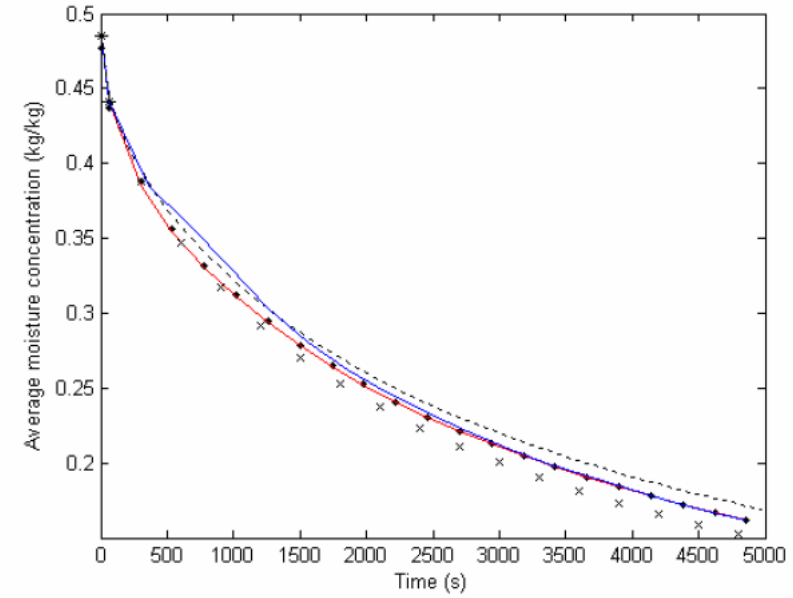

FIGURE 4.27 – Sortie en boucle ouverte : (u=[49.5 deg C 10.0%]) (x) et (u=[45 deg C 20.0%])]) (-). Sortie en boucle fermée : trajectoire de référence (points), PID multivariable (bleu continu), Prédictive multivariable (rouge continu).

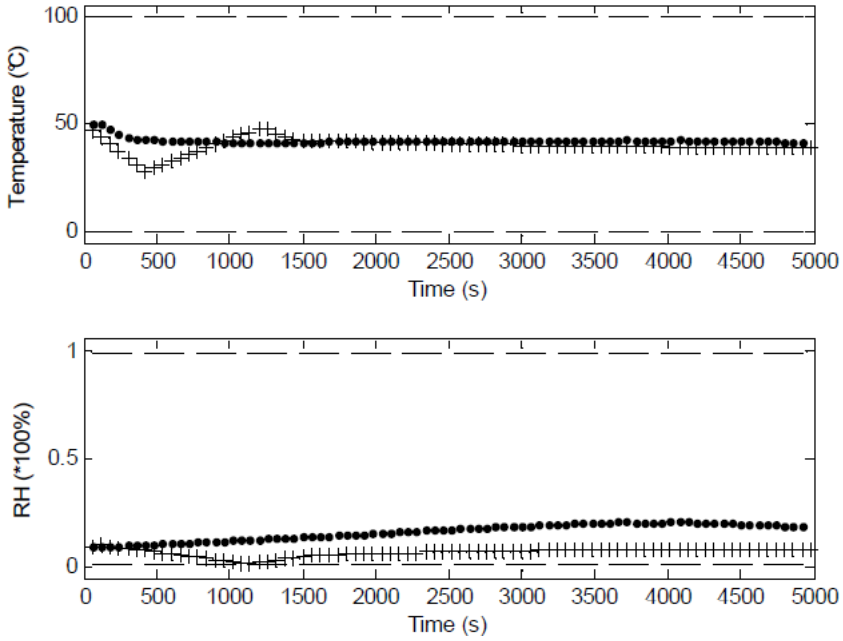

FIGURE 4.28 – Commande en boucle fermée : PID multivariable (+), Prédictive multivariable (o), et bornes des contraintes.

alimentaires. Les meilleures performances, en termes de suivi de trajectoire, ont été obtenues avec la commande prédictive multivariable (l'erreur est de l'ordre de $0,29\%$). Cela mène à de meilleurs résultats qu'avec le PID, ou qu'avec la commande

Type de commande	Monovariable en %	Multivariable en %
u=[49.5 deg C 10.0%])	-	4.36
u=[45 deg C 20.0%])	-	4.12
PID	2.08	1.98
Prédictive	0.34	0.29

FIGURE 4.29 – Comparaison des performances pour diverses structure de commandes.

prédictive monovariable (avec la température de l'air comme entrée unique).
Ce travail a donné lieu à 1 article de revue internationale avec comité de lecture [ARIACL10] [37] .
Jeroen de Temmerman est en poste depuis juillet 2008 dans l'industrie en Belgique (Dsquare).

4.8 Développement d'un logiciel : MPC@CB

En janvier 2007, j'ai déposé auprès de la filiale EZUS de l'UCBL1 mon propre logiciel de commande prédictive : MPC@CB [38]. L'idée est d'avoir un outil central qui s'adapte assez rapidement à divers procédés, divers problèmes, et utilisable pour de nouveaux développements d'approches théoriques. Avec MPC@CB, l'objectif final est de pouvoir réaliser une conduite optimale d'un procédé : en effet, les matières premières utilisées dans les flux entrants de la production ont souvent des caractéristiques qui ne sont pas forcément les mêmes au cours du temps, et qui peuvent n'être que partiellement connues. Leur modélisation et paramètres de modèle sont donc incertains. Concernant les phénomènes ayant lieu dans le procédé, son modèle peut être plus ou moins représentatif de la réalité, et ses paramètres plus ou moins connus avec certitude. Grâce à l'automatisation en ligne des variables de commande de la production par MPC@CB, basé sur un modèle et à une mesure en ligne (au moins), des produits finaux en fin d'opération/sortie du procédé peuvent être obtenus avec des caractéristiques plus homogènes, plus conformes aux spécifications de production attendues. Le tout, pendant l'opération, en optimisant un critère de production (minimisation de consommation énergétique, minimisation du temps d'opératoire, ...), tout en prenant en compte diverses contraintes (sécurité, zone opératoire, ...).
MPC@CB est initialement un ensemble de codes sources exploitables sous Matlab, permettant de réaliser la commande prédictive sous contraintes d'un procédé continu du temps. MPC@CB est sortie dans sa première version (03.20) en janvier 2007 et est toujours en cours de développement. En juin 2009, j'ai répondu à un appel à projet de valorisation de la recherche lancé par Lyon Science Transfert. Mon projet a été sélectionné (un tiers des projets sélectionnés), et pour un budget de l'ordre de

37. Publication personnelle : référence complète dans la partie CV (2.7).
38. http ://MPC-AT-CB.univ-lyon1.fr

50 kE[39], je fais intervenir depuis l'hiver 2009/2010 deux sociétés de service spécialisées en calcul scientifique pour transformer ces codes sources en un véritable logiciel indépendant de Matlab et avec une réelle interface graphique utilisateur. La version commerciale doit être livrée au printemps 2011. Ceci permettra donc plus facilement de l'utiliser sur d'autres projets. En janvier 2011, la dernière version est en cours de dépôt à l'Agence de Protection des Programmes (APP).
En termes d'encadrement scientifique, MPC@CB a été utilisé depuis sa création en 2007 dans 3 thèses (dont 1 hors UCBL1) et 1 stage postdoctoral que j'ai tous encadrés (officiellement ou non) : Da Silva, Bombard, Daraoui et De Temmerman.
En termes de communications scientifique, MPC@CB a été utilisé depuis sa création en 2007 dans 3 articles de revues internationales avec comité de lecture, 7 congrès internationaux avec comité de sélection et avec actes, 2 congrès nationaux avec comité de sélection et avec actes.

4.9 Publications personnelles dans cet axe

Dans cet axe de recherche sur la commande prédictive que j'ai poursuivi après ma thèse, mon bilan personnel de publications, après ma prise de fonction depuis 2001, est résumé comme suit :

- 4 articles de revue internationale avec comité de lecture

Références	Journaux	Années	Jeunes chercheurs co-signataires
ARIACL12	IFAC Control Engineering Practice	2010	N. Daraoui
ARIACL11	Chemical Engineering Science Journal	2010	I. Bombard et B. da Silva
ARIACL10	Computers and Chemical Engineering	2009	J. de Temmerman
ARIACL07	Computers and Chemical Engineering	2005	D. Edouard

L'article ARIACLS2 a été soumis le 6 novembre 2010 à Computers and Chemical Engineering, et B. da Silva est le jeune chercheur co-signataire

- 1 article de revue nationale avec comité de lecture

Références	Journaux	Années	Jeunes chercheurs co-signataires
ARNACL02	Sciences et Technologies de l'Automatique (e-STA)	2004	(aucun)

- 9 communications en congrès internationaux avec comité de sélection et avec actes
- Il y a également :

39. Sources de financement : PRES Université de Lyon (LST), Grand Lyon, Région Rhônes-Alpes, Fonds FEDER, Ministère de l'Enseignement Supérieur et de la Recherche.

Références	Congrès	Années	Jeunes chercheurs co-signataires
CIACSAA17	AFSIA-EFCE	2009	N. Daraoui
CIACSAA16	17th IFAC World Congress	2008	B. da Silva
CIACSAA14	18th ESCAPE	2008	B. da Silva
CIACSAA13	18th ESCAPE	2008	N. Daraoui
CIACSAA12	5th ADC	2007	N. Daraoui
CIACSAA11	26th IEEE CCC	2007	K. Abid, I. Bombard
CIACSAA09	1st IWSID	2004	(aucun)
CIACSAA08	3rd IEEE CIFA	2004	(aucun)
CIACSAA07	14th IDS	2004	(aucun)

(a) 2 communications publiées lors de congrès nationaux avec comité de sélection et avec actes [CNACSAA02] en 2009 et [CNACSAA01] en 2008 avec entre autres Bombard et B. da Silva en jeunes chercheurs co-signataires.

(b) 1 communication dans un congrès international avec comité de sélection et sans acte [CIACSSA04] en 2004 avec entre autres D. Edouard en jeune chercheur co-signataire.

(c) 1 communication en congrès national avec comité de sélection et sans acte [CNACSSA01] en 2007 avec entre autres D. Edouard en jeune chercheur co-signataire.

Chapitre 5

Axe de recherche : identification optimale en boucle fermée

Sommaire

5.1 Aspects théoriques 89
5.1.1 Introduction 89
5.1.2 Contexte et problématiques 89
5.1.3 Formulation proposée 90
5.2 Encadrement de jeunes chercheurs : bilan 91
5.3 Thèse (LAGEP) de Flila 92
5.3.1 Introduction 92
5.3.2 Formulation utilisée 92
5.3.3 Étude de cas : réaction de saponification 96
5.3.4 Étude de cas : procédé de cuisson de peintures en poudre 100
5.3.5 Conclusion 105
5.4 Thèse (LECAP, LAGEP) de Labbane 106
5.4.1 Introduction 106
5.4.2 Sujet et plan 106
5.4.3 Premiers résultats 107
5.5 Développement d'un logiciel : ODOE4OPE 108
5.6 Publications personnelles dans cet axe 108

5.1 Aspects théoriques

5.1.1 Introduction

En ingénierie, il est beaucoup fait appel à des méthodes basées sur des représentations par modèle dynamique. Ces modèles peuvent être utilisés à des fins d'automatisation, mais aussi seulement pour comprendre les phénomènes et pouvoir mener des analyses en simulation (en boucle ouverte). L'étape de modélisation est donc importante et commune à un très large spectre d'applications (biologie, chimie, mécanique, électricité, sciences du vivant ...). Au final, le modèle décrivant un procédé comporte généralement des paramètres qui ne sont pas a priori tous connus de façon précise. Ces paramètres doivent donc être identifiés numériquement pour obtenir un modèle de simulation qui représente de manière satisfaisante le comportement du procédé. L'identification est justement l'ensemble des méthodes qui visent à déterminer les valeurs numériques des paramètres mis en jeu dans un modèle. En automatique, l'identification paramétrique est un sujet très largement étudié depuis plusieurs décennies : [26, 14, 16]. Cela consiste généralement en deux étapes :

- dans un 1er temps, on réalise des expérimentations sur le procédé, par excitation sur les conditions opératoires manipulables durant l'expérience. Le choix de cette entrée d'excitation est une question décisive pendant la phase d'identification, puisqu'elle influe sur la qualité des mesures utilisées lors de l'identification, et donc sur la valeur de ces paramètres estimés. Du point de vue des applications en ingénierie, il existe de nombreuses approches, mais elles reposent assez souvent sur des bases statistiques (plan factoriel par exemple). L'identification repose donc aussi sur un point important : la collecte de données expérimentales. Issu des travaux de Fisher en 1925, le plan d'expériences a été remis en vogue dans les années soixante : cela vise à tirer le maximum des résultats expérimentaux en rationalisant les expériences afin d'estimer par la suite des paramètres de modèle. Parfois, on peut avoir la chance d'être en mesure de créer de nouveaux jeux de données (si possible pertinents) alors que dans d'autres cas, on ne pourra qu'utiliser des données existantes (sont elles pertinentes ?).
- dans un 2nd temps, ces données entrée/sortie sont traitées par un algorithme (à choisir) pour en extraire la valeur numérique des paramètres du modèle non connus jusqu'ici. Des méthodes d'identification, graphiques ou le plus souvent numériques, qui sont assez nombreuses, sont donc utilisées.

5.1.2 Contexte et problématiques

De nombreux travaux existent sur les 2 points précédents (design d'expérience et estimation), mais peu concernent ces 2 problèmes traités conjointement, en ligne, et encore moins d'une façon optimale pour le design dynamique des entrées. Dans ce domaine de l'identification, on se focalise donc ici sur le problème couplé de design optimal d'expérience [32] et d'identification en ligne [22], où la question principale

est la suivante : comment les signaux d'excitation d'un procédé (à son entrée), à appliquer pour obtenir les mesures (sorties) utilisées pour l'identification, peuvent-ils être choisis d'une façon optimale en ligne. En plus, la valeur de ces paramètres inconnus du modèle doit être en même temps estimé et ce en prenant compte de diverses contraintes d'utilisation du procédé réel. Le choix de la valeur de ces entrées d'excitation est en effet une question importante, puisque cela influe sur la qualité des mesures y utilisées lors de l'identification, et donc sur la valeur des paramètres du modèle θ identifiés. Au niveau bibliographique, on trouve encore très assez peu de travaux pour ce type de problèmes. Pour une classe bien précise de systèmes non linéaires dans le domaine des bioréacteurs, les auteurs [38] ont présenté une méthodologie du plan d'expérience optimale pour l'estimation des paramètres. En 2001-2002, Keesman et Stigter ont trouvé des solutions analytiques pour un modèle de bioréacteur. Dans ce cas, la loi de commande est obtenue explicitement en résolvant un ensemble d'équations algébriques, produit par la différentiation répétée de la condition d'optimalité de Pontryagin basée sur la formulation hamiltonienne associée au modèle et à la fonction coût, dépendant de la sensibilité paramétrique. [38] ont présenté une autre approche adaptative pour laquelle le problème de conception du contrôle est résolu en ligne pour le cas d'un modèle de bioréacteur particulier. Dans ce cas, les meilleures estimations de l'ensemble des paramètres sont introduites dans la loi de commande pour concevoir un signal d'entrée optimal, avec un critère de coût basé sur la matrice d'information de Fisher. L'estimation courante des paramètres est trouvée en utilisant un algorithme récursif d'estimation paramétrique. L'inconvénient majeur est que cette approche est à nouveau formulée pour un type bien particulier de modèle, et n'est pas forcément adaptable pour une autre classe de modèles. Dans le domaine de l'aérospatiale, une technique de conception d'entrée optimale pour l'estimation des paramètres d'avion est présentée dans [21]. L'idée originale est la combinaison d'une méthode de programmation dynamique avec un algorithme de gradient pour la synthèse d'entrée optimale, dont la forme est paramétrée avant l'optimisation (de type bang bang). Cette approche inclut des contraintes physiques sur les variables d'entrée et de sortie. L'inconvénient majeur de toutes ces méthodes est donc qu'aucune d'entre elles n'est quasi-générique, ce que l'on se propose aussi d'étudier ici.

5.1.3 Formulation proposée

En conclusion d'un article de 2008 [15], il est écrit "model-based experiment design can become a standard tool for experimentalists and industrial applications". Au LAGEP, depuis 2006, nous avons justement commencé à développer une approche automatisée (basée sur le modèle) du design du plan d'expériences pour la modélisation de procédés continus (du temps), et pour laquelle de très nombreux horizons en recherche et en applications existent. L'idée, pour nous, est la suivante : pour une structure choisie de modèle dynamique, l'approche permet de fournir, conjointement l'expérience optimale à réaliser et les estimations des paramètres initialement incon-

nus du modèle. Bien entendu, cette approche est soumise à des hypothèses, mais qui peuvent être vérifiées. Cette nouvelle approche de commande (conduite) en boucle fermée utilise divers outils de l'automatique avancée étudiés dans notre équipe SNLEP au LAGEP : systèmes continus (du temps), observateur (capteur logiciel) et commande prédictive. Cette approche couvre 2 aspects :

- d'une part, l'automatisation et l'optimisation du design du plan d'expériences,
- et d'autre part, et en même temps, l'estimation de paramètres d'un modèle d'un procédé.

En général, ces deux fonctions sont réalisées l'une après l'autre, et assez souvent par des outils en boucle ouverte, hors ligne, et avec des approches statistiques. Ici, ces 2 aspects sont couverts en même temps via une conduite prédictive couplée avec une technique de capteur logiciel (observateur), l'ensemble basé sur une structure du modèle dynamique du procédé. Par ailleurs, pendant l'opération, diverses contraintes (sécurité, zone opératoire, ...) peuvent être formulées afin de maintenir le fonctionnement du procédé dans un mode opératoire souhaité. Du point de vue académique, à notre connaissance, nous sommes pour le moment les seuls à travailler sur cette approche globale avec ces outils et les domaines d'applications sont très divers : tous les domaines (chimie, mécanique, bio ...) nécessitant d'obtenir un modèle dynamique entrée/sortie pour son automatisation (contrôle, diagnostic) ou pour créer un simulateur (boucle ouverte). Comme cette approche a commencé à être développée dans la thèse de Flila, nous allons préciser cette approche dans la partie décrivant les résultats de thèse de Flila.

5.2 Encadrement de jeunes chercheurs : bilan

Depuis ma nomination en septembre 2001 sur le poste que j'occupe actuellement, dans cet axe de recherche sur l'identification optimale en boucle fermée (débuté en 2006), j'ai eu l'occasion de participer (officiellement) à l'encadrement de 2 jeunes chercheurs en thèse de doctorat.

- février 2010 à février 2013, Walid Labbane, "Conduite optimale automatisée de plan d'expériences pour l'identification paramétrique" cotutelle de thèse entre l'ENI Tunis (Université Tunis El Manar- LECAP) et l'UCBL1 (LAGEP) co-encadrée par le Prof. H. Hammouri, le Prof. N. Benhadj Braiek et A.S. Tlili et P. Dufour (25 %)
- janvier 2006 - 5 février 2010, Saida Flila, "Identification optimale et commande prédictive : application aux procédés" , thèse de doctorat de l'UCBL1 au LAGEP, co-encadrée par le Prof. H. Hammouri et P. Dufour (50 %)

5.3 Thèse (LAGEP) de Flila

5.3.1 Introduction

Dans cette thèse, les objectifs étaient de formuler les 1ers résultats pour cette nouvelle approche d'identification optimale en boucle fermée, notamment en termes de structure de commande et de problème d'optimisation à résoudre. Ensuite, il s'est agi d'évaluer ces approches sur 2 systèmes simulés issus du génie des procédés.
J'ai co-encadré cette thèse à 50 % avec le Prof. H. Hammouri.

5.3.2 Formulation utilisée

Cette partie a pour but de présenter une stratégie de commande optimale en boucle fermée pour l'identification en ligne du paramètre inconnu du modèle. Dans un souci de simplification des notations, on présente ici les principes de l'approche qui a été développée dans le cas le plus simple : un procédé à une entrée u, une sortie y_p et un paramètre constant θ du modèle choisi à estimer. La sensibilité de la sortie du procédé par rapport au paramètre inconnu du modèle détermine dans quelle mesure celui-ci peut être identifié à partir des données expérimentales entrée/sortie. Si la sensibilité de la sortie y_p par rapport au paramètre θ est petite ou nulle, alors :

- soit la sortie n'est pas bien choisie : il faut choisir structurellement une autre sortie,
- soit ce paramètre n'influence aucune sortie : le paramètre n'est donc structurellement pas identifiable,
- soit le signal d'entrée choisi n'excite pas suffisamment le modèle à identifier : la valeur de l'entrée doit être choisie différemment.

Hypothèse 5.1 *La sortie contient structurellement des informations sur le paramètre à identifier : le paramètre influence la sortie qui est bien choisie.*

Ici, on s'intéresse à la troisième problématique : le réglage du signal d'entrée. Des outils contraints de commande en boucle fermée et un observateur sont utilisés ici, dans le but de maximiser la sensibilité de la mesure vis à-vis du paramètre à identifier, tout en tenant compte de diverses contraintes. Cette approche peut être a priori employée sur un procédé modélisé par un modèle dynamique continu linéaire ou non linéaire, décrit par des équations aux dérivées ordinaires ou partielles. Le modèle de sensibilité paramétrique est explicitement déduit du modèle et est employé par la commande. Le contrôle optimal et l'estimation du paramètre du modèle sont obtenus conjointement en ligne. Les divers éléments de cette structure de commande sont maintenant détaillés, afin d'arriver à la formulation finale du problème de commande prédictive pour l'identification. Dans ce cadre, l'idée principale de cet algorithme d'identification est d'estimer en boucle fermée et en ligne le paramètre constant inconnu du modèle du procédé en utilisant : la mesure du procédé, un modèle (en tant que structure), un observateur et un modèle de sensibilité, le tout dans une approche de commande prédictive par modèle interne. Tous ces éléments

(sauf la mesure) sont basés sur le modèle du procédé. La question est : comment choisir la séquence d'entrée $u(t)$ optimale telle que le signal de sortie $y_p(t)$ soit le plus riche pour son utilisation dans l'observateur ? Ceci est traduit comme étant la maximisation de la sensibilité $\frac{\partial y_p}{\partial \theta}(t)$ de la mesure du procédé $y_p(t)$ par rapport au paramètre constant θ. Par ailleurs, pendant l'utilisation du procédé pour l'identification, on exige que quelques contraintes doivent être satisfaites à tout moment, afin de maintenir l'utilisation du procédé dans une zone de fonctionnement :

- les entrées doivent rester dans une zone de fonctionnement due aux contraintes physiques. Tout actionneur, selon la technologie utilisée, aura en effet une plage d'utilisation limitée et une vitesse caractéristiques. Ceci se fait via des contraintes inégalitaires ne portant que sur les commandes.
- les grandeurs d'état et/ou de sortie doivent rester dans une certaine zone de fonctionnement définie. Cela peut être lié à la sécurité ou à l'objectif à atteindre en termes de qualité du produit final. Ces contraintes sont également formulées via des contraintes inégalitaires. Celles ci dépendent des mesures, des estimations et éventuellement des commandes.

Ainsi, le problème d'optimisation contraint pour l'identification $(POCI_I)$ peut être formulé initialement sous :

$$(POCI_I)\begin{cases} \max\limits_{\tilde{u}} J(\tilde{u}) = \sum\limits_{j=k+1}^{k+N_p} \left(\frac{\partial y_p}{\partial \theta}(j)\right)^2 \\ \tilde{u} = \{p_u(1), ..., p_u(n_{pu})\} \\ u(j) = f_u(p_u(i), j, k) \; i \in [1, n_{pu}] \\ \\ \forall k > 0, \; \forall \; j \in [k, k+N_p-1] \; : \\ \; u_{min} \leq u(j) \leq u_{max} \\ \Delta u_{min} \leq \frac{u(j)-u(j-1)}{T_e} \leq \Delta u_{max} \\ \\ \forall \; k > 0, \; \forall \; j \in [k+1, k+N_p], \\ ...\forall \; i \in \mathrm{I}^{n_c} = \{1, ..., n_c\} : \\ c_i\left(y_p(j), x_p(j), \alpha, \theta, u(j-1)\right) \leq 0 \end{cases} \tag{5.1}$$

où k est l'index du temps présent, j est l'index du temps futur, les $p_u(i)$ sont les n_{pu} éléments du vecteur de paramétrisation de la commande recherchée u (contrainte en amplitude, voire aussi en vitesse) sur l'horizon de prédiction N_p. Il y a n_c contraintes c_i à vérifier faisant intervenir la sortie mesurée y_p, les paramètres du modèle (celui inconnu θ, ceux connus α) et les états x_p du procédé.

Classiquement, le problème principal de cette formulation initiale de commande prédictive est que, à l'instant présent k, elle est basée sur des signaux dans le futur j :

- la sensibilité $\frac{\partial y_p}{\partial \theta}$ de la sortie mesurée y_p du procédé par rapport au paramètre θ,
- la mesure du procédé y_p,
- le paramètre inconnu à estimer θ,

- et l'état du procédé x_p.

Malheureusement, ces valeurs ne sont pas disponibles dans le futur à l'instant présent k, alors que la mesure du procédé y_p est la seule valeur disponible à chaque instant k. Afin d'obtenir un problème d'optimisation soluble, l'idée est d'approcher ces signaux en utilisant les mesures et les états estimés à l'instant k, et l'intégration du modèle du procédé dans une structure de commande par modèle interne (où l'entrée u est donc appliquée en parallèle sur le procédé et sur le modèle choisi). Dans cette approche, un modèle continu (M) est utilisé. On suppose ici qu'il est représenté par un système non linéaire d'équations différentielles continues (5.2), de structure a priori quelconque (pour le moment) :

$$(M)\begin{cases} \dot{x}_m(t) = f(x_m(t), \alpha, \theta, u(t)), & t > t_i \\ y_m(t) = h(x_m(t), \alpha, \theta, u(t)), & t > t_i \\ x_m(t) = x_m^{t_i}, \quad t = t_i \end{cases} \tag{5.2}$$

où $x_m \in \mathbb{R}^n$, $u \in U \subset \mathbb{R}$ et $y_m \in \mathbb{R}$ sont respectivement le vecteur d'état, la commande (contrainte en amplitude, voire aussi en vitesse) et la sortie. t est la variable indépendante du temps et t_i le temps initial. La différence entre α et θ est que α est le vecteur des paramètres du modèle à valeurs connues, tandis que θ est le paramètre du modèle à valeur inconnue pour lequel le problème de conception de l'entrée optimale est énoncé ici.

Hypothèse 5.2 *f et h sont de classe C^1.*

Une des utilisations des observateurs [1] est liée au problème d'identification : les paramètres à estimer y sont considérés comme de nouvelles variables d'états. On obtient alors un système augmenté pour lequel on cherche à réaliser un observateur d'état permettant aussi d'estimer les variables d'état non mesurées.

Hypothèse 5.3 *L'état x_o de l'observateur (O) $x_o = [\hat{x_p}\ \hat{\theta}]$, constitué de l'état estimé du procédé $\hat{x_p}$ augmenté de celui du paramètre estimé $\hat{\theta}$, est observable.*

Hypothèse 5.4 *Toute entrée rend le système utilisé dans la synthèse de l'observateur uniformément observable [CIACSAA20],[ARIACLS1]*[1] .

La conception et la synthèse d'un tel observateur sont étroitement liées à la structure du modèle (M) et à la commande appliquée au système. En utilisant l'hypothèse précédente et la théorie des observateurs pour les systèmes non linéaires, un observateur (O) est construit, basé sur le modèle (M), pour estimer en ligne les variables d'état non mesurées du procédé $\hat{x}_p(k)$ et le paramètre inconnu $\hat{\theta}(k)$. Ce paramètre est donc estimé à chaque période de temps par cet observateur, et sa valeur est en plus introduite dans le contrôleur prédictif (en tant qu'entrée de perturbation estimée) afin d'améliorer les résultats d'optimisation.
Définissons maintenant le modèle de sensibilité (M_θ). Il décrit l'évolution du vecteur d'état $x_\theta = \frac{\partial x_m}{\partial \theta}\mathbb{R}^n$ et de la sortie $y_\theta = \frac{\partial y_m}{\partial \theta} \in \mathbb{R}$, qui sont respectivement la

1. Publication personnelle : référence complète dans la partie CV (2.7).

sensibilité de l'état du modèle (M) par rapport au paramètre θ et la sensibilité de la sortie du modèle (M) par rapport au paramètre θ.

$$(M_\theta)\begin{cases} \dot{x}_\theta(t) = \frac{\partial}{\partial t}\frac{\partial x_m}{\partial \theta}(t) = f_\theta(x_\theta(t), x_m(t), \alpha, \hat{\theta}(t), u(t)), & t > t_i \\ y_\theta(t) = \frac{\partial y_m}{\partial \theta}(t) = h_\theta(x_\theta(t), x(_m t), \alpha, \hat{\theta}(t), u(t)), & t > t_i \\ x_\theta(t) = 0, \quad t = t_i \end{cases} \tag{5.3}$$

Les signaux issus de ces 2 modèles sont utilisés pour prédire, dans un temps futur discret j sur l'horizon de prédiction N_p, le comportement du signal réel équivalent, en tenant compte de l'écart actuel (à l'instant discret k) entre le signal procédé et le signal modélisé. Cette erreur est classiquement supposée constante sur l'horizon de prédiction, et mise à jour à chaque instant k avec les nouvelles mesures. Ceci représente le retour de mesures pour notre contrôleur. En utilisant l'observateur (O) et les modèles (M) et (M_θ), les signaux utilisés dans la formulation initiale du problème d'optimisation sous contraintes pour l'identification $(POCI_I)$ peuvent ainsi être approchés à chaque instant présent k dans les instants futurs j :

$$\begin{cases} \forall k \geq 0,\ \forall\ j \in [k+1, k+N_p] : \\ \ x_p(j) = x_m(j) + (\hat{x}_p(k) - x_m(k)) \\ \ y_p(j) = y_m(j) + (y_p(k) - y_m(k)) \\ \frac{\partial y_p}{\partial \theta}(j) = \frac{\partial y_m}{\partial \theta}(j) \\ \forall k \geq 0 : \\ \theta = \hat{\theta}(k), \end{cases} \tag{5.4}$$

Basée sur ces approximations, la formulation initiale du problème d'optimisation contrainte pour l'identification $(POCI_I)$ est reformulée sous la forme $(POCI_M)$:.

$$(POCI_M)\begin{cases} \max_{\tilde{u}} J(\tilde{u}) \\ J(\tilde{u}) = \sum_{j=k+1}^{k+N_p} \left(\frac{\partial y_m}{\partial \theta}(j) + (\frac{\partial y_p}{\partial \theta}(k) - \frac{\partial y_m}{\partial \theta}(k))\right)^2 \\ \tilde{u} = \{p_u(1), ..., p_u(n_{pu})\} \\ u(j) = f_u(p_u(i), j, k)\ i \in [1, n_{pu}] \\ \text{soumis aux contraintes sur la commande :} \\ \begin{cases} \ u_{min} \leq u(j) \leq u_{max} \\ \Delta u_{min} \leq \frac{u(j)-u(j-1)}{T_e} \leq \Delta u_{max} \\ \forall\ j \in [k, k+N_p-1] \end{cases} \\ \text{soumis aux contraintes sur la sortie :} \\ \begin{cases} c_i(y_m(j) + (y_p(k) - y_m(k)), ... \\ ...x_m(j) + (\hat{x}_p(k) - x_m(k)), ... \\ ...\alpha, \hat{\theta}(k), u(j)) \leq 0, \\ \forall\ k \geq 0... \\ ...\forall\ j \in [k+1, k+N_p],\ \forall\ i \in \mathrm{I}^{n_c} \end{cases} \\ \text{basé sur la résolution en ligne des modèles} \\ (M),\ (M_\theta) \text{ et de l'observateur } (O). \end{cases} \tag{5.5}$$

Ce problème d'optimisation peut donc maintenant être résolu par n'importe quel algorithme disponible pour ce type de problème d'optimisation sous contraintes [2]. Durant l'expérience, il permet conjointement de déterminer en ligne la commande optimale à appliquer et d'identifier le paramètre inconnu. Avec un problème comportant ici une entrée, une sortie et un paramètre inconnu, la complexité vient principalement de la taille du vecteur d'état et des modèles de sensibilité à formuler explicitement. Numériquement, avec les méthodes actuelles, il y a donc peu de réserves, comme cela sera vu dans les exemples traités.
Au niveau faisabilité, les hypothèses impliquent qu'un observateur puisse tout d'abord être écrit explicitement (ce qui dépend de la structure du modèle employé). Une autre hypothèse précise que toute entrée rend le système uniformément observable, ce qui peut restreindre la classe des systèmes étudiés, notamment du fait que pour le moment, l'entrée recherchée n'est pas contrainte en ce sens. Durant cette thèse, on a aussi réalisé la formulation de cette même approche basée sur un modèle linéarisé du modèle initial (M) (qui peut être non linéaire), ce qui doit permettre de diminuer la charge de calcul en ligne, dans le cas où le temps disponible devient limitant avec le modèle non linéaire.

5.3.3 Étude de cas : réaction de saponification

5.3.3.1 Introduction

On s'intéresse ici à évaluer notre approche d'identification sur un cas simple, sans vouloir se focaliser, dans un 1er temps, sur l'importance des résultats (quant à leur utilisation). Cela concerne l'identification d'un seul paramètre du modèle sur un procédé chimique de saponification.

5.3.3.2 Commande : objectifs et modèle

Un modèle constitué par une équation non linéaire aux dérivées ordinaires a été considéré, où la concentration de l'acétate d'éthyle $C_a(t)$ dans le réacteur est à la fois l'état et la sortie du système. $D(t)$ est le débit d'alimentation en soude à manipuler (la commande). Au niveau des paramètres, le volume constant du réacteur V et la valeur initiale C_{ain} sont connus. La constante de vitesse de réaction k_v est le paramètre inconnu car l'incertitude sur ce paramètre favorise le plus l'erreur de prédiction pendant le transitoire.

$$\begin{cases} \dot{C}_a(t) = -k_v C_a^2(t) + \frac{D(t)}{V}\big(C_{ain} - C_a(t)\big), \ t > 0 \\ C_a(t) = C_a^0, \ t = 0 \end{cases} \tag{5.6}$$

5.3.3.3 Commande : résultats

Ce modèle, utilisé dans la loi de commande, peut être ré-écrit sous la forme générique (M) de la méthode proposée précédemment :

2. Cet algorithme a été implanté dans le logiciel ODOE4OPE : http ://ODOE4OPE.univ-lyon1.fr

$$(M)\begin{cases} \dot{x_1}(t) = -\theta_1 x_1^2(t) + \frac{u(t)}{\alpha_1}(\alpha_2 - x_1(t)),\ t > 0 \\ y(t) = x_1(t),\ t > 0 \\ x_1(t) = x_1^0,\ t = 0 \end{cases} \tag{5.7}$$

Basé sur ce modèle, un observateur (O) peut être construit, par exemple basé sur [17], pour estimer $x_o = [x_{o\ 1}\ x_{o\ 2}]^T = [\hat{x}_{p\ 1}\ \hat{\theta}_1]^T$ avec :

$$(O)\begin{cases} \dot{x_o}(t) = A_o(y_p(t))x_o(t) + B_o(u(t)) - ... \\ ...S_o^{-1}C^T(Cx_o(t) - y_p(t)),\ t > 0 \\ \dot{S}_o(t) = -\theta_o S_o(t) + A_o^T(y_p(t))S_o(t)... \\ ... - S_o(t)A_o(y_p(t)) + C^T C,\ t > 0 \end{cases} \tag{5.8}$$

où θ_o est le paramètre de réglage de cet observateur avec les matrices :

$$\begin{cases} A_o(y_p(t)) = \begin{pmatrix} 0 & -y_p^2(t) \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \\ B_o(u(t)) = \begin{pmatrix} \frac{u(t)}{\alpha_1}(\alpha_2 - y_p(t)) \\ 0 \end{pmatrix} \\ C = [1\ 0] \end{cases} \tag{5.9}$$

Le problème d'optimisation pour l'identification en ligne est de trouver un profil optimal de débit d'alimentation en soude $D(t)$ qui maximise la sensibilité $\frac{\partial C_a}{\partial k_v}(t)$ de la concentration d'acétate d'éthyle $C_a(t)$ mesurée par rapport à la constante de vitesse de réaction k_v. La commande subit des contraintes d'amplitude et de vitesse :

$$\begin{cases} 0\ \ \text{mol.min}^{-1} \leq D(k) \leq 0,03\ \ \text{mol.min}^{-1}\ \forall k \\ -0,003\ \ \text{mol.min}^{-2} \leq \frac{D(k)-D(k-1)}{T_e} \leq 0,003\ \ \text{mol.min}^{-2}\ \forall k \end{cases} \tag{5.10}$$

Par ailleurs la concentration d'acétate d'éthyle mesurée dans le réacteur peut être limitée afin d'étudier l'influence d'une contrainte sortie sur les performances :

$$C_a(.) \leq C_a^{max} = 10^{-3}\text{mol.l}^{-1} \tag{5.11}$$

Deux cas ont été simulés dans les conditions suivantes :

- Cas 1 : la maximisation recherchée de sensibilité n'est soumise qu'aux deux contraintes d'amplitude et de vitesse sur la commande, l'évolution de la sortie est libre.
- Cas 2 : idem cas 1, si ce n'est que la sortie doit désormais rester en dessous du maximum fixé par la contrainte de sortie, ceci afin d'évaluer le cadre général de l'algorithme d'optimisation sous contraintes d'entrée/sortie.

Les paramètres du modèle à valeur connue sont : $V = 100l, C_{ain} = 1mol.l^{-1}$. Dans la simulation du procédé, $k_v = 4,73l.mol^{-1}.min^{-1}$ (la valeur recherchée) et la condition initiale est $C_0 = 10^{-4}mol.l^{-1}$. Pour la résolution de l'observateur et du modèle, afin de voir la robustesse de l'approche, on impose 30% d'erreur initiale par rapport aux paramètres du procédé simulé : $C_0 = 0,7.10^{-4}mol.l^{-1}, k_0 = 3,31l.mol^{-1}.min^{-1}$.

Le paramètre de réglage de l'observateur $\theta_o = 0,02$, le paramètre de réglage du problème d'optimisation $n_{pu} = 1$ (on recherche donc une commande échelon sur l'horizon de prédiction), l'horizon de prédiction $N_p = 10$ et la période d'échantillonnage $T_e = 1min$. Pour résoudre ce problème d'optimisation, un solveur à programmation quadratique séquentielle est utilisé (la routine fmincon de la boîte à outils d'optimisation de Matlab).
En termes de résultats, les simulations montrent (Fig. 5.1) que la prise en compte de la contrainte sortie réduit la valeur de la sensibilité maximisée (Fig. 5.2). Cette maximisation se traduit sur la commande qui est, dans le cas 1, à chaque fois saturée soit en amplitude, soit en vitesse (Fig. 5.3). Mais, dans le cas 2, après avoir suivi pendant les 3 premières minutes le même comportement que dans le cas 1, la commande diminue en amplitude pour aller se stabiliser à une valeur constante (faible, mais non nulle). Ceci est dû à la prise en compte de la contrainte sortie (Fig. 5.1) qui arrive progressivement à saturation (à partir de 30 minutes). Parallèlement, dans les deux cas, la commande appliquée au procédé et à l'observateur permet d'identifier le paramètre constant inconnu (Fig. 5.4), et ce, malgré une erreur initiale d'estimation de 30%. Du fait de la contrainte sortie, la convergence vers cette valeur est différente dans les deux cas, alors que le cas 2 permet en plus de garantir un fonctionnement désiré du réacteur pendant l'identification, via la contrainte de sortie qui est posée et vérifiée. Par ailleurs, les régimes transitoires de l'observateur et pour la prise en compte de la contrainte sortie ont lieu en même temps, ce qui montre que l'observation et l'optimisation sous contraintes sont bien traitées de façon couplée, dynamiquement, et en même temps.

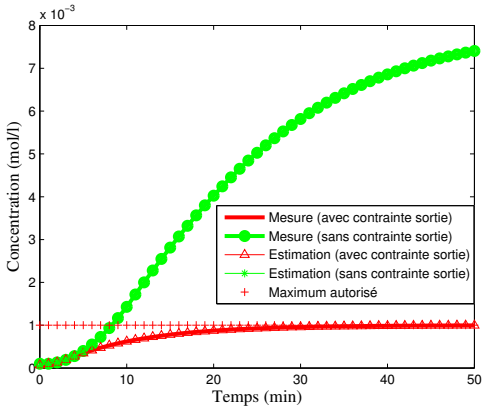

FIGURE 5.1 – Sortie en boucle fermée : concentration d'acétate d'éthyle.

5.3.3.4 Conclusion

L'approche permet bien d'estimer en ligne le paramètre initialement inconnu, en réalisant conjointement l'ajustement de l'entrée de façon optimale. Par ailleurs, la conduite avec contrainte sortie permet bien de garantir (s'il n'y a pas de perturbation sur la sortie et/ou l'état quand cette contrainte est proche de la saturation) qu'une

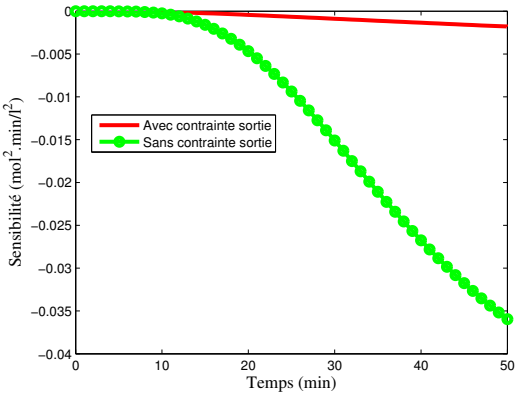

FIGURE 5.2 – Sensibilité de la sortie (concentration d'acétate d'éthyle) par rapport au paramètre inconnu estimé (coefficient d'absorption), en boucle fermée.

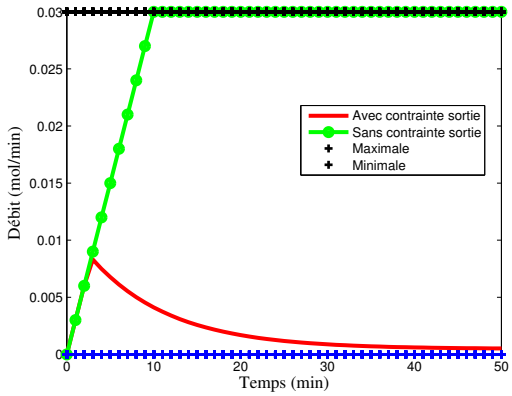

FIGURE 5.3 – Commande optimale en boucle fermée : débit de soude.

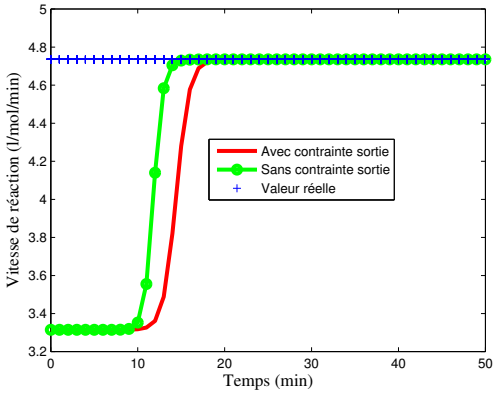

FIGURE 5.4 – Estimation du paramètre inconnu (vitesse de réaction) en boucle fermée.

valeur de sortie maximale spécifiée n'est pas dépassée. Cette contrainte sortie a un impact certain sur la valeur de la commande, ce qui se répercute sur l'estimation du paramètre : la convergence vers la valeur cible a bien lieu, mais est retardée par rapport au cas sans contrainte sortie.

5.3.4 Étude de cas : procédé de cuisson de peintures en poudre

5.3.4.1 Introduction

On applique ici notre approche d'identification sur un cas plus complexe que le précédent, afin d'évaluer les performances sur un système classiquement étudié au LAGEP et modélisé par des équations aux dérivées partielles. L'idée est aussi de comparer les approches (modèle de prédiction non linéaire ou linéarisé). Cela concerne l'identification d'un paramètre d'importance du modèle, pour le procédé de cuisson de peinture (sur un support plan et métallique sous infrarouge) étudié dans le cadre de la thèse de Bombard [2], présenté en 4.5 de ce mémoire.

5.3.4.2 Commande : objectifs et modèle

La conduite en ligne de ce procédé de cuisson par infrarouge a été étudiée précédemment au LAGEP [2] pour la partie automatique et l'objectif était de montrer la robustesse d'une loi de commande prédictive en temps réel de ce procédé. L'importance d'un des paramètres incertains du modèle (le coefficient d'absorption α_p sur la surface irradiée), en termes d'impact sur la sortie, a été mis en évidence. La variable de commande est toujours le flux infrarouge appliqué sur l'échantillon, et la variable mesurée est toujours la température sur la face non exposée au flux infrarouge. Le modèle de connaissance précédemment décrit par une équation de diffusion non linéaire (4.23)-(4.28) est de nouveau utilisé. Les phénomènes de l'émetteur, complexes à modéliser, à mesurer et dépendant de la commande, y sont de nouveau simplifiés. Ici, nous nous sommes intéressés à trouver la commande optimale $\phi_i(t)$ qui maximise la sensibilité de la mesure $T_s(e_p + e_s, t)$ par rapport au paramètre α_p (supposé constant), tel qu'il soit identifié d'une façon optimale. D'autre part, on doit assurer la conduite de système tout en tenant compte des divers contraintes de fonctionnement : le flux infrarouge calculé doit être physiquement admissible et le film de peinture doit être acceptable en termes de qualité (i.e., la cuisson doit se faire en dessous d'une température maximum connue). Afin de réaliser le design de l'observateur, dans le modèle (4.23)-(4.28), nous avons négligé la dynamique de réticulation ($dx/dt(z,t)$) car elle est beaucoup plus faible que la dynamique thermique. Le modèle a ensuite été discrétisé spatialement par la méthode des différences finies (comme pour l'étude précédente de commande sur ce procédé). N_s est le nombre de points dans la partie substrat, et N_p le nombre de points dans la partie peinture. La seule mesure disponible est celle de la température en bas de support $T_s(e_p + e_s, t)$. L'étude de l'observabilité du système global nous a mené à faire une rotation au modèle discrétisé et à augmenter le vecteur d'état pour que le système global puisse

être observable. Nous obtenons alors le nouveau système étendu écrit sous la forme suivante [TDOCES02] [3] , où le paramètre α_p, rajouté au vecteur d'état initial, est considéré comme un nouvel état à dynamique nulle :

$$\begin{cases} \frac{dT_{s_{N_s}}}{dt} = \frac{\lambda_s}{\rho_s C_s \Delta z_2^2}[(T_{s_{N_s-1}} - 2T_{s_{N_s}}) - \frac{2h_2}{\lambda_s}(\sigma\varepsilon_s(T_{s_{N_s}}^4 - T_2^4) \\ \qquad +h_{a_s}(T_{s_{N_s}} - T_2))], & \forall t > 0 \\ \frac{dT_{s_i}}{dt} = \frac{\lambda_s}{\rho_s C_s \Delta z_2^2}(T_{s_{i-1}} - 2T_{s_i} + T_{s_{i+1}}), & \forall i \in]1, N_s[, \quad \forall t > 0 \\ \frac{dT_{p_{N_p}}}{dt} = \frac{\lambda_p}{\rho_p C_p \Delta z_1^2}[T_{p_{N_p-1}} - (1 + \frac{\lambda_s h_1}{\lambda_p h_2})T_{p_{N_p}} + \frac{\lambda_s h_1}{\lambda_p h_2} T_{s_{N_p+1}}] \forall t > 0 \\ \frac{dT_{p_i}}{dt} = \frac{\lambda_p}{\rho_p C_p \Delta z_1^2}(T_{p_{i-1}} - 2T_{p_i} + T_{p_{i+1}}), & \forall i \in]1, N_p[, \quad \forall t > 0 \\ \frac{dT_{p_1}}{dt} = \frac{\lambda_p}{\rho_p C_p \Delta z_1^2}(T_{p_1} + 2T_{p_2}) + \frac{2h_1}{\lambda_p}[\alpha_p \phi_i - \sigma\varepsilon_p(T_{p_1}^4 - T_1^4) \\ \qquad -h_{a_p}(T_{p_1} - T_1)], & \forall t > 0 \\ \frac{d\alpha_p}{dt} = 0, & \forall t > 0 \end{cases} \tag{5.12}$$

L'estimation de α_p et de (T_s, T_p) peut être obtenue en utilisant un observateur, par exemple basé sur [18] :

$$\begin{cases} \dot{\hat{x}}(t) = A(u)\hat{x}(t) + \varphi(y, \hat{x}) - S_{\theta_o}^{-1} C^T (C\hat{x} - y) \\ \dot{S}_{\theta_o} = -\theta_o S_{\theta_o} - A^T(u) S_{\theta_o} - S_{\theta_o} A(u) + C^T C \end{cases} \tag{5.13}$$

où $\hat{x}(t) = (\hat{T}_{s_i}, \hat{T}_{p_i}, \hat{\alpha}_p)^T$ est l'estimation de $x(t) = (T_{s_i}, T_{p_i}, \alpha_p)^T$, $u(t) = \phi_i(t)$ et $y(t) = T_s(e_p + e_s, t) = T_{s_{N_s}}(t)$ sont respectivement l'entrée et la sortie [TDOCES02] [4] . L'objectif du contrôle optimal est de déterminer le flux infrarouge $\phi_i(t)$ qui maximise la sensibilité $\frac{dT_s}{d\alpha_p}(e_p + e_s, t)$, du coefficient d'absorption α_p par rapport à la température de support $T_s(e_p + e_s, t)$ mesurée. Le tout, en respectant les contraintes d'amplitude du flux infrarouge ainsi que, dans certains cas, la limitation en température de la sortie mesurée. Le problème d'optimisation s'écrit :

$$\begin{cases} \min_{\tilde{\phi}_i} J(\tilde{\phi}_i) = \sum_{j=k+1}^{k+N_p} \left(\frac{1}{\left(\frac{dT_s}{d\alpha_p}(e_p + e_s, j)\right)^2 + \kappa^2} \right) \\ \tilde{\phi}_i = \phi_i(k) \end{cases} \tag{5.14}$$

3. Publication personnelle : référence complète dans la partie CV (2.7).
4. Publication personnelle : référence complète dans la partie CV (2.7).

avec des limitations sur l'amplitude de la commande :

$$\phi_{i_{min}} \leq \phi_i(j) \leq \phi_{i_{max}} \ , \ \forall \ j \in [k, k+N_p-1] \tag{5.15}$$

et la température de support $T_s(e_p+e_s,t)$ peut être limitée pour des questions de qualité du produit final :

$$T_s(e_p+e_s)(.) \leq T_s(e_p+e_s)^{max} \tag{5.16}$$

Les simulations ont été réalisées dans les conditions suivantes :

- la période d'échantillonnage T_e vaut 1s (ce qui rend le temps de calcul critique vis-à-vis de la dynamique de ce procédé),
- pour la résolution numérique du modèle, différentes simulations utilisant la méthode des différences finies ont été effectuées. Le procédé est simulé avec une discrétisation de 3 points dans le film peinture et 3 points dans le support métallique,
- l'horizon de prédiction N_p est fixé à 10,
- les bornes sur l'amplitude de la commande sont les suivantes :

$$0 \ \ W.m^{-2} \leq \phi_i(t) \leq 23500 \ \ W.m^{-2} \tag{5.17}$$

- concernant la contrainte sur la sortie qui peut être prise en compte ou non :

$$T_s(e_p+e_s)^{max} = 420 \ K \tag{5.18}$$

- les conditions initiales sont :

$$\begin{cases} \text{pour le procédé simulé :} \\ \\ T_{p_i}(0) = 306 \text{ K } \forall i \\ T_{s_i}(0) = 306 \text{ K } \forall i \\ \alpha_p = 0.53 \\ \\ \text{pour l'observateur et le modèle :} \\ \\ \hat{T}_{p_i}(0) = 299 \text{ K } \forall i \\ \hat{T}_{s_i}(0) = 299 \text{ K } \forall i \\ \hat{\alpha}_p(0) = 0.42 \text{ (soit environ 20 \% d'erreur initiale)} \end{cases} \tag{5.19}$$

En termes de modèle de prédiction, 2 types de simulation ont été effectuées : la 1ère avec le modèle non linéaire, la 2nde avec le modèle linéarisé. Par ailleurs, dans chaque cas, la contrainte sortie a été soit prise en compte, soit non prise en compte, afin de voir son impact sur les résultats.

5.3.4.3 Commande : résultats

En termes de résultat d'optimisation, on peut voir tout d'abord que la contrainte sortie (Fig. 5.5) impacte la valeur des sensibilités (Fig. 5.6), et que celle ci est la même quel que soit le modèle de commande utilisé.

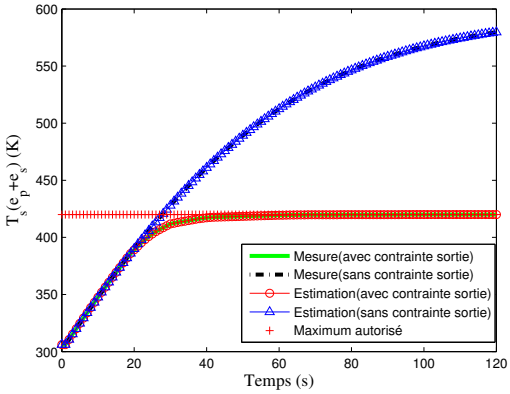

FIGURE 5.5 – Sortie en boucle fermée : température face inférieure du support.

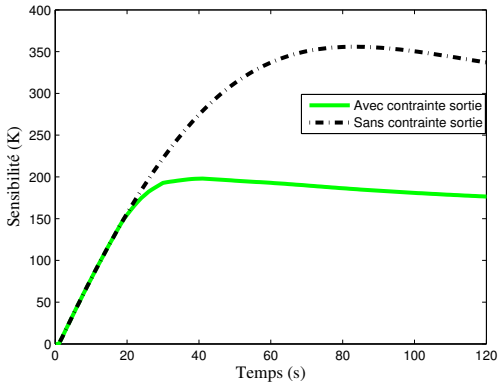

FIGURE 5.6 – Sensibilité de la sortie (température face inférieure du support) par rapport au paramètre inconnu estimé (coefficient d'absorption), en boucle fermée.

En effet, le choix du type de modèle n'influe pas sur la sensibilité car la sortie mesurée suit alors le même comportement (que la contrainte de sortie soit prise en compte ou non). En termes de commande, cette contrainte de sortie a également un fort impact. Par contre, les approximations faites par le modèle linéarisé temps variant (par rapport au modèle non linéaire) et la non convexité du problème d'optimisation (surtout pour le modèle non linéaire) ont leur importance sur la valeur de la commande déterminée à chaque instant. Dans le cas linéarisé (Fig. 5.7), celle-ci est bien plus continue que dans l'autre cas (Fig. 5.8), ce qui est plus intéressant pour les actionneurs.

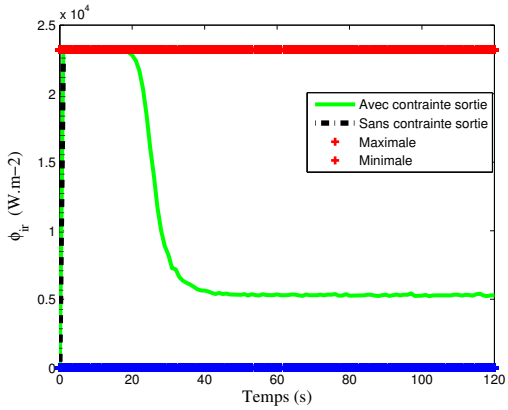

FIGURE 5.7 – Commande en boucle fermée (avec modèle linéarisé temps variant) : flux infra rouge émis.

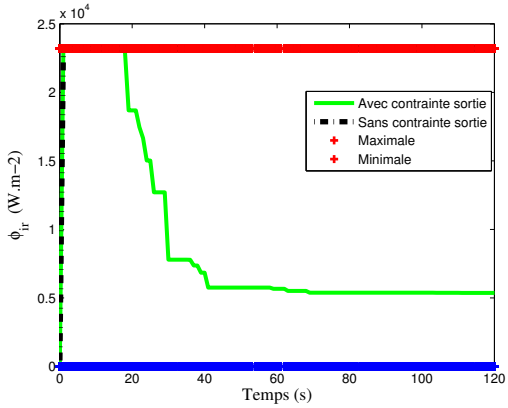

FIGURE 5.8 – Commande en boucle fermée (avec modèle non linéaire) : flux infra rouge émis.

Au final, étant donné le problème contraint posé d'une part, et les commandes déterminées d'autre part, on peut voir que la convergence vers la valeur recherchée du paramètre se fait très rapidement, et de la même façon dans tous les cas traités, et ce malgré une erreur initiale de 20% (Fig. 5.9).

L'utilisation d'un modèle linéaire temps variant à la place d'un modèle non linéaire permet aussi de diminuer le temps de calcul moyen d'un facteur 60 (de 38s à 0.6s) et le temps maximum dans un rapport 270 (de 250s à 0.93s). Avec le modèle linéaire temps variant, l'algorithme est donc implémentable en temps réel (la période d'échantillonnage est ici de 1s), ce qui n'est pas le cas en modèle non linéaire, alors que les résultats sont par ailleurs assez identiques.

5.3.4.4 Conclusion

Les résultats de simulation ont été établis sur un modèle de procédé de cuisson de peinture non linéaire régi par des équations aux dérivées partielles non linéaires et à

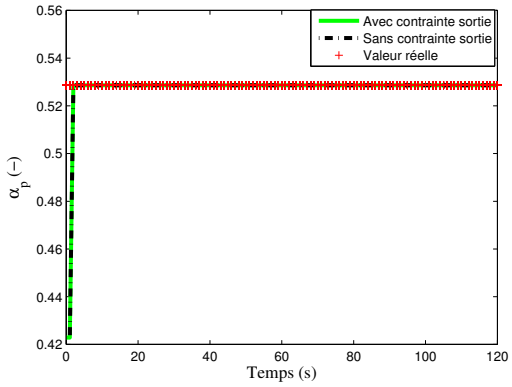

FIGURE 5.9 – Estimation du paramètre inconnu en boucle fermée : coefficient d'absorption.

commande frontière. Ce modèle complexe a permis de valider l'algorithme d'identification optimale basé sur le modèle de commande non linéaire, ainsi que l'algorithme d'identification optimale basé sur le modèle linéaire temps variant. Nous avons pu comparer le temps de calcul ainsi que la qualité des résultats obtenus avec les deux stratégies de contrôle optimal dans le cadre d'une identification en ligne. Dans les deux cas, les deux approches sont exploitables en termes de simulation et d'estimation. Cependant, à ce jour, seule l'approche linéaire temps variant peut être utilisée expérimentalement car le temps de calcul pour l'algorithme de commande est critique pour cette application.

5.3.5 Conclusion

L'objectif principal de ce travail a été d'apporter les premières réponses pour la contribution quant à l'approche de contrôle optimal en boucle fermée pendant la phase d'identification. Ceci a été développé dans un cadre mono entrée, mono sortie et mono paramètre à estimer. Il s'agissait de trouver la commande à appliquer pendant l'expérience qui permettait d'optimiser un critère qui est fonction de la sensibilité de la sortie par rapport au paramètre inconnu du modèle à identifier. En ce sens, c'est une approche permettant d'automatiser et d'optimiser le design d'expérience, tout en réalisant conjointement l'identification d'un paramètre initialement inconnu du modèle spécifié. Cette approche a permis de déterminer une méthodologie assurant le design d'expérience pour l'identification en assurant d'une part, le mode de fonctionnement pour la conduite de système sous la limitation des contraintes physiques d'exploitation et d'autre part, l'identification en ligne du paramètre inconnu du modèle. En vue d'un contrôle optimal, la commande prédictive par modèle interne a été retenue, et dans l'objectif d'une identification, la technique des observateurs a été adoptée pour une estimation du paramètre du modèle. La structure du modèle joue donc un rôle important dans l'approche. Les deux problèmes de contrôle optimal et d'identification ont été couplés comme problème global de

commande en boucle fermée. Les 3 hypothèses majeures concernent 1/ la structure du modèle en termes de sensibilité entre le paramètre à estimer et la sortie mesurée ; 2/ l'existence d'un observateur pour estimer en ligne le paramètre, voire le reste de l'état. 3/ l'entrée déterminée est persistante. Deux approches ont été formulées : la première basée sur une approche totalement non linéaire au niveau des modèles, la seconde basée sur une linéarisation des modèles non linéaires, afin de diminuer le temps de calcul nécessaire pour calculer la commande, aidant à l'implémentation en ligne de cet algorithme. Diverses contraintes ont pu être prises en compte : celles classiques sur l'entrée et celles sur la sortie (voire aussi sur l'état qui est estimé ici). Les perspective de ce travail sont assez nombreuses, tant d'un point de vue fondamental qu'appliqué, et des travaux sont à l'étude actuellement dans la thèse de W. Labbane.
Ce travail de thèse a donné lieu à 4 communications à un congrès international avec comité de sélection et actes [CIACSAA20, CIACSAA19, CIACSAA18, CIACSAA15] [5] . 1 publication dans une revue internationale à comité de lecture a été soumise à l'automne 2010 [ARIACLS1] [6] .
Saida Flila a poursuivi avec un ATER de septembre 2009 à juillet 2010 à l'Université de Bourgogne.

5.4 Thèse (LECAP, LAGEP) de Labbane

5.4.1 Introduction

Cette thèse se réalise en cotutelle entre LAGEP, UMR 5007 CNRS-Université Claude Bernard Lyon 1, et le Laboratoire d'Étude et de Commande Automatique de Processus (LECAP), Université de Monastir. On cherche à poursuivre les travaux préliminaires précédemment décrits de la thèse de S. Flila, en vue d'apporter de nouveaux outils pour optimiser le design optimal d'expériences, tout en réalisant pendant l'expérience l'identification en ligne de paramètres du modèle choisi.
1 communication à une conférence nationale avec comité de sélection et actes vient d'être acceptée [CNACSAA03] [7] .
Walid Labbane est actuellement enseignant contractuel à l'ESC Tunis.

5.4.2 Sujet et plan

Les grands objectifs de cette thèse sont les suivants :

- Tout d'abord, on s'intéressera à l'étude de cas et à des applications de cette approche générique pour les systèmes "simples" de type linéaire (entre l'entrée et la sortie). En effet, pour un système du 1er ordre, il est certes évident qu'une entrée de type échelon permet d'estimer la constante de temps pendant la réponse dynamique du système. Il reste cependant à formaliser notre approche

5. Publication personnelle : référence complète dans la partie CV (2.7).
6. Publication personnelle : référence complète dans la partie CV (2.7).
7. Publication personnelle : référence complète dans la partie CV (2.7).

pour ce type de modèles courants (1er ordre, 1er ordre retardé, 2nd ordre, bilinéaire, ...). Ceci doit permettre aussi de mettre en évidence pour cet étudiant en thèse les principes de bases de l'approche.

- Par la suite, on s'intéressera à l'étude de cas et applications de cette approche générique pour les systèmes non linéaires plus particuliers (pour lesquels la solution optimale n'est pas évidente), à savoir non uniformément observables : en effet, certains systèmes ont la propriété que, pour certaines valeurs de l'entrée appliquée, le système n'est plus observable. Dans ce cas, l'observation ne peut donc être réalisée. Nous allons donc continuer à développer une théorie des observateurs pour des systèmes non uniformément observables. Plusieurs facteurs doivent donc être pris en compte lors de l'application d'observateurs non linéaires : la forme du modèle, l'observabilité des états et la sensibilité des mesures vis à vis des états. Il manque cependant encore à ce jour une approche systémique permettant de spécifier, à travers des contraintes, les entrées à éviter qui rendent le système inobservable. Ainsi, ces contraintes peuvent être spécifiées explicitement dans le problème de commande prédictive, afin de trouver des valeurs de commande rendant le système observable. Le problème de conduite optimale sera là aussi résolu.
- On continuera en cherchant aussi à comparer, dans le cas plus réaliste de signaux de mesures bruités, des observateurs de type grand gain avec des observateurs à horizon glissant. Les résultats recherchés concernent la diminution de l'effet du bruit sur la variabilité de l'estimation, et l'impact sur la dynamique de convergence des estimations vers leurs valeurs cible. Par ailleurs, la technique à horizon glissant est une approche duale de la commande prédictive que nous utilisons déjà dans cet algorithme.
- Là aussi, afin de se rapprocher de cas plus réalistes, l'approche générique actuellement développée dans le cas le plus simple devra être étendue : en effet, actuellement, il existe un algorithme basé sur un modèle à une entrée, une mesure de sortie et un paramètre à estimer. Il s'agit ici de développer une approche multi entrées, multi sorties, multi paramètres pour un problème ainsi multi objectifs. Des problèmes de dimensionnement et de priorité d'objectifs seront à résoudre, tout en pensant à l'aspect temps réel afin de pouvoir être implanté en ligne.

5.4.3 Premiers résultats

Le 1er objectif de la thèse a été de réaliser et de résumer une étude bibliographique sur le design du plan d'expériences couplé à l'identification [CNACSAA03] [8] . Pour cela, divers mots clefs ont été sélectionnés : (optimal) experimental design, design of (optimal) experiment(s), DOE, input design. Une analyse de 90 publications a été réalisée.
Dans un premier lieu, si on se base sur le nombre d'articles publiés par année, le premier article [24] date des années 80, il y en a eu 17 dans les années 90 (dont 3

8. Publication personnelle : référence complète dans la partie CV (2.7).

pendant les 5 premières années et 14 pendant les 5 dernières), et 56 dans la première décennie de ce siècle (soit un taux de 74% du nombre total, dont 23 pendant les 5 premières années et 33 pendant les 5 dernières). Donc, il y a une croissance d'environ dix articles tous les cinq ans, ce qui montre clairement que la recherche dans ce domaine prend son essor depuis 1992.
Il est clair que ces articles sont publiés sur un large spectre de journaux et de conférences. Mais on remarque que 36 articles, soit un taux de 45% de ceux répertoriés ici, ont été publiés dans des revues classiques d'automatique. D'un autre côté, on trouve que le reste des publications est dispersé dans divers journaux qui traitent de plusieurs domaines d'applications tels que la biologie, la microbiologie alimentaire, la bioinformatique, les mathématiques appliquées.
Une particularité intriguante concerne la communauté de chercheurs : dans le monde, ce sujet est étudié très principalement en Europe et surtout entre la Belgique et les Pays Bas. On peut donc dire qu'il y a un noyau très fort et assez lié de chercheurs, mais peu nombreux dans ce domaine (15 personnes majeures). Par ailleurs, ce noyau de chercheurs est issu de départements d'automatique, de génie électrique, ou d'ingénierie, ce qui est corrélé avec les journaux et conférences principaux ciblés en publication.
Dans la plupart des cas, les auteurs valident leurs approches sur des modèles décrits par des équations différentielles ordinaires. Il est intéressant de voir qu'il y a beaucoup de modèles fondamentaux utilisés ce qui permet d'interpréter plus facilement les paramètres qu'avec les modèles boites noires.
En termes de méthode, on ne peut pas dire qu'une d'entre elles soit très majoritairement utilisée. La matrice d'information de Fisher a cependant nettement sa place. Des méthodes en ligne de commande optimale pour le design d'expériences optimales couplés à l'identification commence à voir le jour depuis quelques années. Enfin, une attention a été portée aussi pour l'utilisation de modèles dynamiques de sensibilités pour assurer une entrée optimale, tel que nous le supportons dans notre approche.

5.5 Développement d'un logiciel : ODOE4OPE

Cette approche est d'une part tout à fait nouvelle et d'autre part clairement utilisable très rapidement pour une phase de design d'expériences pour l'identification. Un nouveau logiciel, ODOE4OPE[9] est donc à l'étude depuis quelques mois et bénéficiera de l'expérience de valorisation acquise pour MPC@CB. La 1ère version de ce logiciel est en cours de dépôt auprès de l'APP.

5.6 Publications personnelles dans cet axe

Dans cet axe de recherche sur l'identification en ligne que j'ai débuté en 2006, mon bilan personnel de publications est le suivant :

9. http ://ODOE4OPE.univ-lyon1.fr

- 4 communications en congrès internationaux avec comité de sélection et avec actes

Références	Congrès	Années	Jeunes chercheurs co-signataires
CIACSAA20	29th IEEE-CSS CCC	2010	S. Flila
CIACSAA19	29th IEEE-CSS CCC	2010	S. Flila
CIACSAA18	6ième IEEE CIFA	2010	S. Flila
CIACSAA15	17th IFAC World Congress	2008	S. Flila

- Il y a également :
  (a) 1 communication par poster, nationale [CPPN01] où S. Flila est le jeune chercheur co-signataire.
  (b) 1 communication dans une conférence nationale à comité de sélection et avec actes [CNACSAA03] a été acceptée aux 3èmes Journées Identification et Modélisation Expérimentale (JIME), et W. Labbane est le jeune chercheur co-signataire
- Article soumis en revue internationale avec comité de lecture
  L'article ARIACLS1 a été soumis le 21 octobre 2010 à IEEE Transactions on Automatic Control (TAC), et S. Flila est le jeune chercheur co-signataire.

Chapitre 6

Projets de recherche pour l'avenir

Sommaire

6.1 Introduction **113**
6.2 Axe de recherche : identification optimale en boucle fermée **113**
6.2.1 Aspects fondamentaux 113
6.2.2 Collaboration et encadrement 114
6.2.3 Commercialisation de logiciel 115
6.3 Axe de recherche : commande prédictive **115**
6.3.1 Aspects fondamentaux 115
6.3.2 Collaboration et encadrement 116
6.3.3 Commercialisation de logiciel 116

6.1 Introduction

Deux axes de recherche principaux se dégagent pour moi : sur la commande prédictive et sur l'identification optimale en boucle fermée. A partir des résultats obtenus ces dernières années, il me parait clair qu'il y a un très fort potentiel de recherches fondamentales et appliquées à explorer dans cet axe d'identification optimale en boucle fermée. Par conséquent, cet axe devrait prendre dans mes activités de plus en plus d'importance par rapport à l'axe de commande prédictive. Cela se juge par ce qui suit par le nombre de points d'intérêt futurs.

6.2 Axe de recherche : identification optimale en boucle fermée

Suite aux récents travaux réalisés sur ce sujet pendant la thèse de S. Flila, les perspectives de ce travail sont assez nombreuses. La direction reste la même : contribuer à l'approche de conduite automatique optimale en boucle fermée réalisant conjointement le design d'expériences et l'identification de paramètres (inconnus) du modèle. En tant qu'approche générique, les perspectives fondamentale, méthodologique et applicative sont donc très larges.

6.2.1 Aspects fondamentaux

Cette approche doit être étendue :

1. pour divers classes de systèmes simples largement utilisés : 1er ordre, 2nd ordre, bilinéaire, hammerstein, ...
2. pour les systèmes naturellement instables : en effet, avant toute chose, il convient de stabiliser le comportement de tels systèmes, ce qui un des intérêts de l'approche par commande prédictive utilisée ici.
3. pour les systèmes multi-entrées, multi-sorties, multi-paramètres, afin de pouvoir l'appliquer sur un plus grand nombre de procédés réels. Cela nécessite donc une approche multi-objectifs, avec une gestion des pondérations.
4. pour les systèmes non linéaires plus particuliers, à savoir non uniformément observables : en effet, certains systèmes ont la propriété que, pour certaines valeurs de l'entrée appliquée, le système n'est plus observable (i.e. l'identification n'est structurellement plus possible). Nous continuerons à développer une théorie des observateurs pour des systèmes non uniformément observables qui prend en compte la classe étudiée de modèle.
5. pour les systèmes non uniformément observables, il faut voir comment spécifier, via des contraintes, les entrées interdites qui rendent le système inobservable. Ainsi, ces contraintes peuvent être spécifiées explicitement dans le problème de commande prédictive, afin de ne trouver que des valeurs de commande rendant le système observable.

6. pour des systèmes plus complexes décrit par des équations aux dérivées partielles où se pose tout d'abord le problème du choix de la discrétisation : faut-il discrétiser le domaine spatial pour se ramener à l'étude en dimension finie, ou alors réaliser la synthèse en dimension infinie et ensuite réaliser une approximation en dimension finie de la loi de commande solution. Dans un premier temps, la première approche, plus simple, sera utilisée. L'influence du caractère réparti sur la sensibilité sera à évaluer. On pourra donc voir aussi dans quelle mesure cette technique est utilisable, y compris en termes de temps de calcul nécessaire (car le nombre de modèles de sensibilité aux équations aux dérivées partielles à résoudre est égal au nombre de sorties multiplié par le nombre de paramètres à déterminer).

On cherchera aussi :

1. à étudier la relation entre la maximisation de la sensibilité des mesures par rapport aux paramètres et la convergence de l'observateur. En effet, pour le moment, la convergence de l'observateur n'est commandée qu'indirectement. L'une des questions est de voir s'il ne serait pas possible de rajouter explicitement dans le problème de commande prédictive un terme lié à cette convergence.
2. à évaluer la robustesse de l'approche en termes d'impact des erreurs de structure de modèle utilisé. En effet, pour le moment, on fait l'hypothèse qu'il n'y a aucune erreur de structure entre le modèle et le procédé réel : ceci n'est malheureusement pas toujours le cas.
3. à comparer, dans le cas plus réalistes de signaux de mesures bruitées, des observateurs de type grand gain avec des observateurs à horizon glissant. Les résultats recherchés concernent la diminution de l'effet du bruit sur les estimations, et l'impact sur la dynamique de convergence des estimations vers leurs valeurs cibles.
4. à étudier l'impact de la paramétrisation de la commande recherchée sur l'horizon de prédiction avec plus qu'un paramètre (un échelon est recherché actuellement).
5. à étudier la reconfiguration de la loi de commande, en cas de mesure aberrante et/ou de capteur défaillant.

6.2.2 Collaboration et encadrement

En attendant de futurs collaborateurs, à ce jour, les personnes avec qui je collabore déjà dans cette thématique sont :

- Prof. Hassan Hammouri (LAGEP), notamment pour son expertise dans le domaine de l'observation.
- Walid Labbane, doctorant du LAGEP en co-tutelle entre l'Université Tunis El Manar et l'UCBL1.

- Prof. Sharad Bhartiya, Département de Génie des Procédés, IIT Bombay (Inde), qui nous a rendu visite en mai 2010 (mois invité de l'UCBL1). Nous avions déjà travaillé ensemble lors de notre stage post-doctoral aux USA en 2000/2001. Comme nous travaillons sur des domaines assez complémentaires en automatique et qu'il est très intéressé par cette nouvelle approche d'identification, nous prévoyons d'entamer de nouveaux projets de recherche. Sharad Bhartiya interviendra pour son expertise en techniques d'optimisation et applications en génie des procédés.
- Lyon Science Transfert m'a permis de me mettre en contact, depuis décembre 2010, avec une SSII très intéressée pour contribuer à de futurs développements théoriques autour du logiciel ODOE4OPE. Un dossier de thèse en CIFRE vient d'être déposé.

6.2.3 Commercialisation de logiciel

Même si c'est une approche basée sur la commande prédictive et l'observation, comme c'est un outil d'aide à la modélisation, je reste intimement persuadé que cette approche à un potentiel d'utilisation bien plus vaste que les procédés dont il faut assurer la conduite en boucle fermée. Avoir un démonstrateur de cette approche est donc un point important pour avoir un fort impact. On cherchera à réaliser un véritable logiciel commercial ODOE4OPE (actuellement en version de base) adaptable rapidement en vue de son utilisation pour le design optimal d'expériences couplé à l'identification paramétrique. On peut ainsi imaginer à terme un logiciel qui permet non seulement de réaliser le plan d'expériences d'une façon automatique et optimale, tout en identifiant conjointement les paramètres du modèle recherché, mais aussi de sélectionner au final le meilleur modèle dans la banque de modèles disponibles. Outre les publications, le site web de ce logiciel sera un des atouts pour promouvoir son utilisation. Avec LST, nous avons un 1er contact avec une SSII qui pourrait nous aider dans les développements techniques et la commercialisation.

6.3 Axe de recherche : commande prédictive

Dans la suite de mes précédents travaux réalisés au LAGEP, il s'agira pour moi de continuer à contribuer à la commande de systèmes complexes issus du génie des procédés, notamment via l'utilisation de MPC@CB sur des procédés industriels. Ceci devrait permettre de créer des collaborations industrielles et d'amener à étudier plus fondamentalement certains problèmes concrets.

6.3.1 Aspects fondamentaux

- Suite aux premières études que nous avons réalisées, on a pu commencer à voir que les lyophilisateurs de produits pharmaceutiques sont des systèmes très complexes à commander. Peu de personnes s'intéressent à ce sujet dans

le monde, et au LAGEP, nous disposons d'une expertise reconnue dans ces procédés.

- Pour de nouveaux procédés, il s'agira de voir comment traduire (si besoin par inférence) un problème de minimisation des coûts énergétiques et de revient du produit final en un problème d'optimisation sous contraintes de trajectoire de références cibles, étant donné les mesures et modèles disponibles. J'attends aussi de ces nouveaux problèmes qu'on puisse formuler de nouvelles approches méthodologiques applicables plus généralement.

6.3.2 Collaboration et encadrement

A ce jour, je n'ai pas de collaboration en cours dans cette thématique. Le potentiel d'utilisateurs est néanmoins là :

- Les chercheurs de l'équipe transferts couplés de matières et de chaleur du LAGEP, avec qui j'ai déjà travaillé en séchage, cuisson et lyophilisation.
- Lyon Science Transfert me permettra de me mettre en contacts avec des utilisateurs à fort potentiel de MPC@CB. Même si le logiciel n'est pas encore finalisé dans sa version commerciale, nous avons déjà des 1ers contacts très intéressants avec le monde industriel. Pour l'un d'entre eux, le logiciel sera utilisé au printemps 2011 dans le cadre d'une étude de commande d'un prototype de véhicule solaire qui sera aligné par la suite dans un course internationale.
- Lors du programme ASGARD en septembre 2010, j'ai pu rencontrer un industriel intéressé par ces approches de commande prédictive. Le démonstrateur de MPC@CB devrait permettre de concrétiser des collaborations dans un cadre industriel.

6.3.3 Commercialisation de logiciel

A l'hiver 2010/2011, MPC@CB entre dans sa phase de passage à la version commerciale. Le cahier des charges ayant été défini avec Mathworks, des entreprises ont pu répondre à notre appel d'offres. Le logiciel commercial sera donc disponible au printemps 2011 et pourra commencer à être exploité. Il y aura plusieurs possibilités pour utiliser ce logiciel :

- Solution clef en main installée sur le procédé sur site avec : pré-étude, modélisation, simulation et adaptation sur site
- Vente de la licence avec formation particulière au logiciel
- Vente de la licence

Bibliographie

[1] G. Besançon. *Non-linear observers and applications. Lecture Notes in Control and Information Science 363.* Springer Verlag, 2007.

[2] I. Bombard. *Contribution à l'étude, au contrôle et à la commande d'un procédé de cuisson radiatif de peintures en poudre.* PhD thesis, UCBL1-CNRS, 2007.

[3] B.Z.Guo, C.Z.Xu, and H. Hammouri. Output feedback stabilization of a one-dimensional wave equation with an arbitrary time delay in boundary observation. *ESAIM : Control, Optimization and Calculus of Variations*, to appear DOI 10.1051/cocv/2010044.

[4] CADDET. Model-based predictive control system saves energy. *CADDET Technical Brochures*, R371, 2000.

[5] S.G. Chai and B.Z. Guo. Well-posedness and regularity of weakly coupled wave-plate equation with boundary control and observation. *Journal of Dynamical and Control Systems*, 15 :331–358, 2009.

[6] P. Chouvenc, S. Vessot, J. Andrieu, and P. Vacus. Optimization of a freeze-drying cycle : A new model for pressure rise analysis. *Drying Technology*, 22(7) :1577– 1601, 2004.

[7] P.D. Christofides. *Nonlinear and robust control of partial differential equation systems : Methods and applications to transport-reaction rrocesses.* Birkhäuser, Boston, 2001.

[8] W. Chu and W.H. Windawi. Control vocs via catalytic oxidation. *Chemical Engineering Progress*, pages 37–43, 1996.

[9] T.J. Crowley, E.S. Meadows, E. Kostoulas, and F.J. Doyle III. Control of particle size distribution described by a population balance of semibatch emulsion polymerization. *Journal of Process Control*, 10 :419–432, 2000.

[10] J. de Temmerman. *Model for the moisture concentration in pasta with control design of the drying air properties.* PhD thesis, KUL, 2008.

[11] D. Edouard, H. Hammouri, and D. Schweich. Observer design for reverse flow reactor. *AIChE Journal*, 50(9) :2155–2166, 2004.

[12] P. Feillet and J.E. Dexter. *Quality requirements of durum wheat for semolina milling and pasta production.* American Association of Cereal Chemists, 1996.

[13] R. Fletcher. *Pratical methods of optimization.* John Wiley and Sons, 1987.

[14] U. Forssell and L. Ljung. Closed-loop identification revisited. *Automatica*, 35(7) :1215–1241, 1999.

[15] G. Franceschini and S. Macchietto. Model-based design of experiments for parameter precision : State of the art. *Chemical Engineering Science*, 63(19) :4846–4872, 2008.

[16] H. Garnier, M. M'Saad, and T. Poinot. *JESA. Identification des systèmes.* JESA, 2008.

[17] J.P. Gauthier, H. Hammouri, and S. Othman. A simple observer for non linear systems application to bioreactors. *IEEE Transactions on Automatic Control*, 37 :875–880, 1992.

[18] H. Hammouri and J. De Leon Morales. Topological properties of observer's inputs analysis of controlled dynamical systems. In *Proceedings of the International Conference on Controlled Dynamical Systems, Lyon, France*, 1990.

[19] A. Hottot, R. Daoussi, and J. Andrieu. Thermophysical properties of aqueous and frozen states of bsa/water/tris systems. *International Journal of Biological Macromolecules*, 38 :225–231, 2006.

[20] C.D. Immanuel and F.J. Doyle III. Open-loop control of particle size distribution in semi-batch emulsion copolymerization using a genetic algorithm. *Chemical Engineering Science*, 57 :4415–4427, 2002.

[21] C. Jauberthie, F. Bournonville, P. Coton, and F. Rendell. Optimal input design for aircraft parameter estimation. *Aerospace Science and Technology*, 10 :331–337, 2006.

[22] K.J. Keesman and J.D. Stigter. Optimal parametric sensitivity control for estimation of kinetic parameters in bioreactors. *Mathematical Biosciences*, 179 :95–111, 2002.

[23] T. Kudra. Energy aspects in drying. *Drying Technology*, 22(5) :917–932, 2004.

[24] S.L. Lehman and L.W. Stark. Three algorithms for interpreting models consisting of ordinary differential equations : Sensitivity coefficients, sensitivity functions, global optimization. *Mathematical Biosciences*, 62(1) :107–122, 1982.

[25] A.I. Liapis and R.J. Litchfield. Optimal control of a freeze dryer-i : theoretical development and quasi steady state analysis. *Chemical Engineering Science*, 34 :975–981, 1979.

[26] L. Ljung. *System Identification : Theory for the user.* Prentice Hall, 1999.

[27] Y.S. Matros and G.A. Bunimovich. Reverse-flow operation in fixed bed catalytic reactors. *Catalysis Reviews-Science and Engineering*, 38(1) :1–68, 1996.

[28] A.S. Mujumdar. Guide to industrial drying, principles, equipment and new developments. In *International Workshop and Symposium on Industrial Drying, Mumbai, India*, 2004.

[29] M.J. Pikal. *Freeze drying. Encyclopedia of Pharmaceutical Technology Third Edition.* Taylor and Francis, 2006.

[30] E. Polak. *Computational methods in optimization.* Academic Press, 1971.

[31] A. Le Pourhiet. *Résolution numérique des équations aux dérivées partielles. Une première approche.* Cepadues Editions, 1988.

[32] L. Pronzato. Optimal experimental design and some related control problem. *Automatica*, 44(2) :303–325, 2008.

[33] S.J. Qin and T.A. Badgwell. A survey of industrial model predictive control technology. *Control Engineering Practice*, 11 :733–764, 2003.

[34] K. Ramdani. *Modélisation d'un réacteur à inversion de flux pour la destruction des COV.* PhD thesis, CPE-CNRS, 2000.

[35] K. Ramdani, R. Pontier, and D. Schweich. Reverse low reactor at short switching periods for voc combustion. *Chemical Engineering Science*, 56(4) :1531–1539, 2001.

[36] J.M. Salla, X. Ramis, J.M. Morancho, and A. Cadenato. Isoconversional kinetic analysis of a carboxyl terminated polyester resin crosslinked with triglycidyl isocyanurate (tgic) used in powder coatings from experimental results obtained by dsc and tmdsc. *Thermochimica Acta*, 388(1-2) :355370, 2002.

[37] D. Semino and W. H. Ray. Control of systems described by population balance equations -i controllability analysis. *Chemical Engineering Science*, 50 :1805–1824, 1995.

[38] J.D. Stigter, D. Vries, and K.J. Keesman. On adaptative optimal input design. In *Proceedings of the European Control Conference ECC*, 2003.

[39] S.A. Velardi, H. Hammouri, and A.A. Barresi. In-line monitoring of the primary drying phase of the freeze-drying process in vial by means of a kalman filter based observer. *Chemical Engineering Research and Design*, 87(10) :1409–1419, 2009.

Chapitre 7

Sélection de quelques publications personnelles

Toutes les références des publications où je suis l'un des co-auteurs sont dans la partie 2.7.
Dans cette annexe, on trouvera une publication par jeune chercheur (post doctorant ou doctorant) que j'ai co-encadré :

- [ARIACL07] avec le jeune chercheur D. Edouard : D. Edouard, P. Dufour, H. Hammouri, "Observer based multivariable control of a catalytic reverse flow reactor : comparison between LQR and MPC approaches", Computers and Chemical Engineering, 29(4), pp. 851-865, 2005. DOI : 10.1016/j.compchemeng.2004.09.018 ISSN : 0098-1354 OAI : hal-00091715

- [CIACSAA16] avec le jeune chercheur B. Da Silva : B. Da Silva, P. Dufour, N. Othman, S. Othman, "Model predictive control of free surfactant concentration in emulsion polymerization ", Proceedings of the 17th IFAC World Congress 2008, Paper 1693, pp. 8375-8380, Seoul, South Korea, July 6-11, 2008. DOI : 10.3182/20080706-5- KR-1001.1693 OAI : hal-00352737

- [ARIACL11] avec les jeunes chercheurs I. Bombard et B. Da Silva : I. Bombard, B. Da Silva, P. Dufour and P. Laurent, "Experimental predictive control of the infrared cure of a powder coating : a non-linear distributed parameter model based approach", Chemical Engineering Science Journal, 2010, 65(2), 962-975. DOI :10.1016/j.ces.2009.09.050 ISSN : 0009-2509 OAI : hal-00434469

- [ARIACL12] avec le jeune chercheur N. Daroui : N. Daraoui, P. Dufour, H. Hammouri, A. Hottot, "Model predictive control during the primary drying stage of lyophilisation", Control Engineering Practice, 2010, 18(5), 483-494 DOI : 10.1016/j.conengprac.2010.01.005 OAI : hal-00434481

- [ARIACL10] avec le jeune chercheur J de Temmerman : J. De Temmerman, P. Dufour, B. Nicolaï, H. Ramon, "MPC as control strategy for pasta drying processes", Computers and Chemical Engineering, 2009, 33(1), 50-57. DOI : 10.1016/j.compchemeng.2008.06.004 ISSN : 0098-1354 OAI : hal-00350086

- [CIACSAA19] avec le jeune chercheur S. Flila : S. Flila, P. Dufour, H. Hammouri, M Nadri, "Closed loop optimal design of experiments for online identification ", 29th IEEE-CSS Chinese Control Conference (CCC) 2010, Paper 194, pp.1178-1183, Beijing, China, July 29-31, 2010. OAI : hal-00469590

Available online at www.sciencedirect.com
SCIENCE DIRECT®
Computers and Chemical Engineering 29 (2005) 851–865
Computers & Chemical Engineering
www.elsevier.com/locate/compchemeng

Observer based multivariable control of a catalytic reverse flow reactor: comparison between LQR and MPC approaches

D. Edouard[a], P. Dufour[b,*], H. Hammouri[b]

[a] LGPC, CPE Lyon, UMR CNRS 2214, 43 Bd du 11 Novembre 1918, 69622 Villeurbanne Cedex, France
[b] LAGEP, Université Claude Bernard Lyon 1, UMR CNRS 5007, 43 Bd du 11 Novembre 1918, 69622 Villeurbanne Cedex, France

Available online 19 November 2004

Abstract

This paper is intended to show the comparison of two closed-loop controllers performances for a catalytic reverse flow reactor (RFR): a linear quadratic regulator (LQR) and a model predictive control (MPC) strategy that both use a high-gain observer. The aim of the RFR is to reduce, by catalytic reaction, the amount of volatile organic compounds (VOCs) released in the atmosphere. The particularity of this process is that the gas flow inside the reactor is periodically reversed in order to trap the heat released during the reaction inside the process. Very few papers are dealing with the control of the RFR. The new multivariable optimal control issue tackled here is to confine the hot spot temperature within two temperature limits, in order to ensure complete conversion of the pollutant and to prevent catalyst overheating, while optimizing the process yield and the consumption of electrical power. Both control laws aim to optimize the tuning of the dilution and the internal electric heating. The model considered here for control of the RFR is obtained from a countercurrent pseudo-homogeneous partial differential equation (PDE) model. The feed concentration (acting as an important input disturbance) and the temperature profile in the RFR are estimated on-line using a high-gain observer based on three temperatures measurements. In order to maintain the safe use of the reactor, the estimate state is injected in the LQR whereas the MPC is based on the estimated input disturbance. Simulation results allow comparing performances of the LQR and the MPC.
© 2004 Elsevier Ltd. All rights reserved.

Keywords: Multivariable control of a catalytic reverse flow reactor; Control of a nonlinear distributed parameter system; LQR; MPC; Observer design

1. Introduction

This paper deals with the multivariable optimal control of a catalytic reverse flow reactor, which topic has not been often be tackled until now. The reverse flow reactor (RFR) aims to destruct volatile organic compounds (VOCs). Even if the definition of VOCs is blurred, it includes noxious products whose chemical reactivity is likely to influence atmospheric pollution. For this reason, they are the source of a lot of environmental problems including: acid rains, woods wasting, greenhouse effect and health hazards. Problems of environmental pollution due to the industrial production are therefore receiving increased attention and due to the public regulations, VOCs discharge in the atmosphere becomes strictly limited. Therefore, the VOCs emission reduction represents a priority, especially since the problem is connected with a large field of activities from large-scale factories to small and medium-sized firms like dry cleaners.

In a previous work, the single input single output (SISO) control of the RFR was treated (Dufour, Couenne, & Touré, 2003). The aim was to control the RFR such that the outlet gas concentration released in the atmosphere was maintained below a maximum level fixed by public regulations. This control strategy was based on a parabolic partial differential equation (PDE) model, an internal model control (IMC) structure and a model predictive control (MPC) framework. According to various regimes, it was shown that the proposed controller was able to tune correctly the control action, i.e. the heating power at the core of the reactor. In the meantime, for

* Corresponding author. Tel.: +33 4 72 43 18 78; fax: +33 4 72 43 16 99.
E-mail address: dufour@lagep.univ-lyon1.fr (P. Dufour).

0098-1354/$ – see front matter © 2004 Elsevier Ltd. All rights reserved.
doi:10.1016/j.compchemeng.2004.09.018

Nomenclature

a_c	specific solid–fluid surface area (m^{-1})
c_{ps}	solid heat capacity ($J\ kg^{-1}\ K^{-1}$)
c_{pmg}	fluid heat capacity ($J\ kg^{-1}\ K^{-1}$)
h	solid–fluid heat transfer coefficient ($W\ m^{-2}\ K^{-1}$)
H	total length of monolith (m)
ΔH	reaction enthalpy ($J\ mol^{-1}$)
k_D	solid–fluid mass transfer coefficient ($m\ s^{-1}$)
M	VOC molecular weight ($kg\ mol^{-1}$)
N'	number of transfer units for heat loss
P	Peclet number for solid–fluid heat transfer
P_{ax}	axial Peclet number for heat conduction
P_θ	P corrected for the finite frequency
Q_j	external power supply (W)
S	total cross-section of the monolith (m^2)
t	time (s)
T_0	inlet and external temperature (K)
T_{g1}, T_{g2}	gas temperature in the upstream, downstream monolith (K)
T_{max}	maximum solid temperature in the RFR (K)
T_s or T	solid temperature (K)
ΔT_{ad}	adiabatic temperature rise (K)
u_{v0}	superficial gas velocity in the reference state ($m\ s^{-1}$)
x	reduced abscissa, $2z/H$
X	state vector
X_e	estimated state vector
y	filtered temperature measurements (K)
z	abscissa (m)

Greek letters

α	fraction of feed flow rate
ε	fraction of open frontal area
θ	period of flow reversal (s)
ξ	reduced abscissa of the boundary between the inert and catalytic monoliths
ξ_θ	ξ corrected for the finite frequency
ρ	fluid density ($kg\ m^{-3}$)
ρ_0	gas density in the reference state ($kg\ m^{-3}$)
ρ_s	solid density ($kg\ m^{-3}$)
τ	heat storage time constant (s)
$\varphi(x)$	characteristic function of the catalytic monolith
$\psi(x)$	$\varphi(x)(\omega_1+\omega_2)/(2\omega_{10})$
ω_1, ω_2	VOC mass fraction in the upstream, downstream monoliths
ω_{10}	VOC mass fraction in the feed
$\omega_{1su}, \omega_{2su}$	VOC mass fraction of solid phase in the upstream, downstream monoliths
Ω	calibration parameter of the observer

a particular regime, the temperature inside the reactor was exceeding a threshold temperature that reflects the deterioration of the catalytic elements. Moreover, the input disturbance was assumed to be relatively constant and measured, whereas unmeasured and large stochastic variations need to be accounted for in reality. The aim of this paper is to provide a multivariable control framework to solve these problems. This requires modifying the PDE model and the control problem to account for a new manipulated variable: the cooling action.

The RFR is modelled by a nonlinear PDE system characterized by complex nonlinearities in the spatial domain. Even with only one spatial dimension, control of PDE systems is not often treated, especially in the nonlinear case. Explicitly, transport reaction phenomena with significant diffusive and convective phenomena are typically characterized by severe nonlinearities and spatial variations, and are naturally described by partial differential equations. Examples of such processes include tubular reactors, packed bed reactors, absorption columns, drying or curing processes. In control theory, due to the complexity of the problem, relatively few studies are devoted to the control of processes explicitly characterized by a PDE model. Even if various methods are proposed to control such distributed parameter systems, there is no general framework yet. In order to implement, with a computer, a low order model based controller, the original PDE model is usually simplified into an ordinary differential equation (ODE) model. Such a finite dimensional approximation is based on the finite differences method, the finite volume method, the orthogonal collocation method or the Galerkin's method. Other works utilized properties of the initial PDE system before finite dimension controller synthesis: Recently, Christofides developed order reduction by partitioning the eigen spectrum of the operator of the PDE system (Christofides, 1998; El-Farra, Armaou, & Christofides, 2003) and methods based on approximate inertial manifold for spatial discretization of the PDE (Armaou & Christofides, 2002; Christofides & Daoutidis, 1997). Other works for controller synthesis of nonlinear PDE systems are based on symmetry groups, infinitesimal generators and invariant conditions (Godasi, Karakas, & Palazoglu, 2002; Palazoglu & Karakas, 2000). Concerning (Hoo & Zheng, 2001; Zheng & Hoo, 2002), finite dimensional controllers are obtained through model reduction based on various methods: singular value decomposition, Karhunen–Loéve expansion or eigenfunction method. With this method, an interesting framework is provided with proof of closed-loop stability for the QDMC of a PDE system (Zheng & Hoo, 2004). In Balas (1998), stability conditions for closed-loop control of linear PDE with finite dimensional controller are given in time domain and frequency domain through semigroup analysis. In Touré and Josserand (1997), based on semigroup theory, proofs were given for the closed-loop stability of PI control for a linear PDE system.

This paper is not intended to propose a new PDE model based control framework but rather to show how advanced

control strategies may be used for the control of the RFR. Indeed, few works are dealing with the control of such process described by a nonlinear PDE model. In this paper, two model-based control strategies for the constrained optimal control of the RFR are compared: linear quadratic regulator (LQR) and MPC which both use a high-gain observer. The LQR is used here in a classical framework (Levine, 1996). MPC was developed for ordinary differential equation models and is well dedicated to solve a constrained problem (Allgöwer, Badgwell, Qin, Rawlings, & Wright, 1999; Mayne, Rawlings, Rao, & Scokaert, 2000; Morari & Lee, 1999; Qin & Badgwell, 2003; Rawlings, 2000). MPC was applied for a few PDE systems in (Eaton & Rawlings, 1990; Irizarry-Rivera & Seider, 1997; Patwardhan, Wright, & Edgar, 1992; Touré, Biston, & Gilles, 1994), where accurate high order dimension models are accounted for. Very recently (Zheng & Hoo, 2004), singular value decomposition and Karhunen–Loéve expansion was used in a QDMC framework. In this paper, we use a MPC strategy (Dufour, Couenne, et al., 2003; Dufour, Touré, Blanc, & Laurent, 2003)that aims to reduce, during the sampling period, the on-line calculation time due to the PDE model based optimization task resolution. This approach is based on a strategy combining the IMC structure and a two-phase approach to account for an approximated model into the controller. This approximated model combines the nonlinear PDE model solved off-line and a time-varying linearized PDE model solved on-line. Such MPC approach combined with IMC, even if a low order model is used to approximate the model, allows reaching the required closed-loop performances (Dufour & Touré, 2004).

The paper is structured as follows: in Section 2, the RFR, the new PDE model and the discretized model are presented. Section 3 aims to remind the observer previously designed. Section 4 deals with the LQR and MPC strategies used here. Finally, simulation results given in Section 5 allow comparing the performances of the LQR and the MPC.

2. Process and modelling

2.1. Process description

A medium-scale RFR for VOC combustion, as schematically shown in Fig. 1 (see Ramdani, Pontier, and Schweich (2001) for instance) has been considered in this work. Cordierite monoliths (corning) of square cross sections with channels of 1 mm × 1 mm are packed in the reactor. Monolith in the core region is catalytically active and is inert in both end sections. A blower located downstream of the RFR keeps aspiration at a constant flow rate. Liquid pollutant (xylene), is injected into ambient air through a capillary tube and is then vaporized before entering the catalytic layer. An electric heater is installed in the core region to increase the temperature, while fresh air dilution (which results in a small feeding rate in the upstream) is employed to reduce the temperature. Fast flow reversal (the period is 16 s) is needed to keep the highest temperature moving in the catalytic region (Nieken, Kolios, & Eigenberger, 1995a,b). The reactor is encapsulated in a rectangular box and is thermally well insulated. Therefore the packed layer is adiabatic, except in the core region where heat loss is inevitable due to both the installation for air dilution and the high temperature in this region. Moreover, the core is not airtight (even if it is closed) and, as a result of leakage, a small net amount of fresh air is aspirated into the core: 5 m^3/h when the flow rate is 100 m^3/h. Three thermocouples are installed in the reactor and will be used to estimate the temperature profile and the inlet pollutant concentration.

The reverse flow reactor used here allows high temperatures in catalyst bed whereas the inlet and outlet gas stream temperatures are close to ambient temperature. Indeed, through periodic flow reversal, the heat released by the reaction is first trapped in the packing and is then used to heat up the feed when the flow direction is reversed. Because of the high efficiency of heat exchange between gas and solid phases, autothermal operation is possible even for a feed with a low adiabatic temperature rise (below 15 K). Moreover, owing to the large heat capacity of the packing, the high temperature plateau established in the packed bed is poorly sensitive to abrupt changes in the inlet concentration. These features make therefore RFR highly competitive for VOCs combustion.

2.2. Countercurrent pseudo-homogeneous model

Taking advantage of the high frequency of flow reversal, this reactor can be approximated by the countercurrent reactor model (Nieken et al., 1995b), as illustrated in Fig. 1. This countercurrent reactor model is a heterogeneous model described by a set of three nonlinear PDEs and one algebraic equation. In order to homogenize and simplify this model, the following model has been introduced by Edouard, Ham-

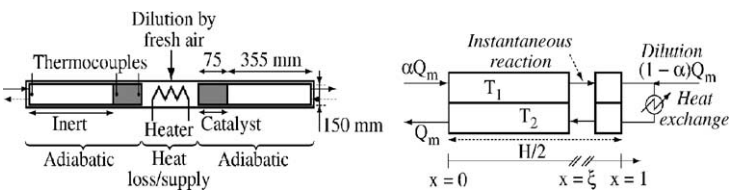

Fig. 1. Left: Main geometrical characteristics of the RFR. Right: The countercurrent model.

mouri, and Schweich (2004). It is based on the method described in (Balakotaiah & Dommeti, 1999) and it assumes that the kinetic reaction can be neglected under strong mass transfer limitation. It allows obtaining the following pseudo-homogeneous model described by (1)–(5): it features one PDE, two algebraic equations to account for mass transfer limitation, and a periodic frequency correction. Normalizing some variables, we obtain:

$$\begin{cases} \left(\dfrac{1}{P_{\mathrm{ax}_\theta}} + \dfrac{1+\alpha^2}{2P_\theta}\right)\dfrac{\partial^2 T_\mathrm{s}(x,t)}{\partial x^2} + \dfrac{1-\alpha}{2}\dfrac{\partial T_\mathrm{s}(x,t)}{\partial x} + P_\theta \Delta T_\mathrm{ad}(t)\psi(x,t) = \tau\dfrac{\partial T_\mathrm{s}(x,t)}{\partial t} \\ \alpha\dfrac{\partial \omega_1(x,t)}{\partial x} + P_\theta\omega_1(x,t) = 0, -\dfrac{\partial \omega_2(x,t)}{\partial x} + P_\theta\omega_2(x,t) = 0 \end{cases} \tag{1}$$

with:

$$\begin{cases} P_\theta = \dfrac{ha_\mathrm{c}H}{2\rho_0 u_{v0} c_\mathrm{pmg}}(1-\dfrac{\theta}{2\tau}),\ \dfrac{1}{P_{ax_\theta}} = \dfrac{2\lambda_\mathrm{ax}^\mathrm{s}}{(H\rho_0 u_{v0} c_\mathrm{pmg})(1-(\theta/2\tau))}, \\ \tau = \dfrac{(1-\varepsilon)\rho_s c_\mathrm{ps} H}{2\rho_0 u_{v0} c_\mathrm{pmg}},\ \Delta T_\mathrm{ad}(t) = \dfrac{\Delta H}{Mc_\mathrm{pmg}}\omega_{10}(t),\ \psi(x,t) = \varphi(x)\dfrac{\omega_1(x,t)+\omega_2(x,t)}{2\omega_{10}(t)}, \\ x = \dfrac{z}{H/2} \end{cases} \tag{2}$$

where x is the normalized space variable, $\varphi(x)$ accounts for the type of monoliths: $\varphi(x) = 0$ in the inert monoliths ($x < \xi_\theta$) and $\varphi(x) = 1$ in the catalytic monoliths ($x \geq \xi_\theta$). The boundary conditions are:

at $x = 0$:

$$\begin{cases} \omega_1(x,t) = \omega_{10}(t) \\ T_\mathrm{g1}(x,t) = T_\mathrm{s}(x,t) - \dfrac{\alpha}{P_\theta}\dfrac{\partial T_\mathrm{s}(x,t)}{\partial x} = T_0 \end{cases} \tag{3}$$

at $x = 1$:

$$\begin{cases} (1+N')(T_\mathrm{g2}(x,t) - T_0) = \alpha(T_\mathrm{g1}(x,t) - T_0) \\ \quad + \dfrac{Q_j}{S\rho_0 u_{v0} C_\mathrm{pmg}} \\ T_\mathrm{g1}(x,t) = T_\mathrm{s}(x,t) - \dfrac{\alpha}{P_\theta}\dfrac{\partial T_\mathrm{s}(x,t)}{\partial x} \\ T_\mathrm{g2}(x,t) = T_\mathrm{s}(x,t) + \dfrac{1}{P_\theta}\dfrac{\partial T_\mathrm{s}(x,t)}{\partial x} \\ \alpha\omega_1(x,t) = \omega_2(x,t) \end{cases} \tag{4}$$

Initial conditions are at $t = 0$:

$$T_\mathrm{g1}(x,t) = T_\mathrm{g2}(x,t) = T_\mathrm{s}(x,t) = T_0 \tag{5}$$

In the above equations, T_0 is the ambient temperature and the feed temperature, T_s the solid temperature and T_g1 and T_g2 are upstream and downstream gas temperatures respectively. Heat loss, in terms of transfer units N', dilution rate $(1-\alpha)$ (percentage of fresh air in downstream flow), and heating power Q_j (in watts) are accounted for in the boundary condition at $x = 1$.

The first term in the left hand side of (1) involves an effective axial heat conductivity given by:

$$\begin{cases} \dfrac{1}{P_{\mathrm{ax}_\theta}} + \dfrac{1+\alpha^2}{2P_\theta} = \dfrac{\lambda_\mathrm{eff}}{\rho_0 u_{v0} c_\mathrm{pmg} H/2(1-(\theta/2\tau))} \\ \lambda_\mathrm{eff} = \lambda_\mathrm{ax}^\mathrm{s} + \dfrac{1+\alpha^2}{2}\dfrac{(\rho_0 u_{v0} c_\mathrm{pmg})^2}{ha_\mathrm{c}} \end{cases} \tag{6}$$

When $\alpha = 1$ (i.e. there is no dilution), λ_eff reduces to the well-known estimate of (Vortmeyer & Schaefer, 1974)as used by Nieken et al. (1995b). Finally, this model has been shown to experimentally match the process behaviour during open-loop control and identification (Edouard et al., 2004).

2.3. Spatial discretization of the model

The discretization techniques used to solve the model (Edouard et al., 2004) is based on the finite difference method. The discretization points are denoted by x_i. In order to obtain a satisfactory temperature profile, simulation requires 201 discretization points. $(T_\mathrm{s}(x_0,t),\ldots,T_\mathrm{s}(x_{100},t))$ and $(T_\mathrm{s}(x_{101},t),\ldots,T_\mathrm{s}(x_{201},t))$ are the respective discretized temperature profile in the inert monolith and the catalytic monolith. The temperature $T_\mathrm{s}(x_0,t)$ and $T_\mathrm{s}(x_{201},t)$ are given by the boundary conditions (3) and (4). In the sequel, we will use the following notation:

$$X^1(t) = \begin{pmatrix} T_\mathrm{s}(x_1,t) \\ \vdots \\ T_\mathrm{s}(x_{100},t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} X_1^1(t) \\ \vdots \\ X_{100}^1(t) \end{pmatrix}$$

$$X^2(t) = T_\mathrm{s}(x_{101},t)$$

$$X^3(t) = \begin{pmatrix} T_\mathrm{s}(x_{102},t) \\ \vdots \\ T_\mathrm{s}(x_{200},t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} X_1^3(t) \\ \vdots \\ X_{99}^3(t) \end{pmatrix}$$

With this notation, the candidate discretized system used for the control takes the following form:

$$\begin{cases} \dot{X}^1(t) = A^1(\alpha(t))X^1(t) + G^1(\alpha(t))X^2(t) + d^1(\alpha(t))T_0(t) \\ \dot{X}^2(t) = A^2(\alpha(t))X^2(t) + G_1^2(\alpha(t))X_{100}^1(t) + G_2^2(\alpha(t))X_1^3(t) + d^2(\alpha(t))\Delta T_{\mathrm{ad}}(t) \\ \dot{X}^3(t) = A^3(\alpha(t))X^3(t) + G^3(\alpha(t))X^2(t) + B^3(\alpha(t))Q_j(t) + d_1^3(\alpha(t))\Delta T_{\mathrm{ad}}(t) + d_2^3(\alpha(t))T_0(t) \end{cases} \tag{7}$$

A^i, B^i, G_i^i and d_i^i expressions are given in Appendix A.

3. High-gain observer

In practice, a model-based control or a supervision strategy may require the knowledge of the temperature profile inside the reactor. One way to obtain such unknown state consists in using physical sensors. However, in many cases, due to cost consideration and physical constraints, the number and types of sensors may be very limited. To avoid this problem, one solution is to design an observer. This method combines a priori knowledge about a physical system (nominal model) with experimental data (some on-line measurements) to provide an on-line estimation of the state and/or the model parameters. In our case, the LQR requires the temperature profile and the MPC strategy is based on the inlet concentration. The observer described and experimentally validated by Edouard et al. (2004) permits to estimate on-line both the inlet concentration and the temperature profile. The pollutant concentration is considered here as an unknown disturbance to estimate. Edouard et al. (2004) assumes that $\Delta T_{\mathrm{ad}}(t)$ can be considered as the response of a second order system. This assumption is not a strong one since any physical signal can be approximated by a response of such a second order filter. The model used to design this observer is therefore a combination of the model (7) and the following second order system:

$$\begin{cases} \dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\Delta T_{\mathrm{ad}}(t) = \zeta(t) \\ \dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\zeta(t) = v(t) \end{cases} \tag{8}$$

where $v(t)$ is an unknown and bounded signal. The observer synthesis derives from the high-gain techniques (see for instance Bornard & Hammouri, 1991; Deza, Busvelle, & Gauthier, 1992; Farza, Hammouri, & Busavon, 1998; Gauthier, Hammouri, & Othman, 1992). Only three temperature measurements are available for the observer design: the temperature at the inlet of the inert monolith ($T_{\mathrm{s}}(x_1, t)$), the temperature at the inlet of the catalytic monolith ($T_{\mathrm{s}}(x_{101}, t)$) and the temperature at the outlet of the catalytic monolith ($T_{\mathrm{s}}(x_{200}, t)$).

In the sequel, we use the following notations for the estimate state $X_{\mathrm{e}}(t)$:

$$X_{\mathrm{e}}(t) = \begin{pmatrix} X_{\mathrm{e}}^1(t) \\ X_{\mathrm{e}}^2(t) \\ X_{\mathrm{e}}^3(t) \end{pmatrix}, \qquad \text{where } X_{\mathrm{e}}^1(t) = \begin{pmatrix} X_{\mathrm{e}1}^1(t) \\ \vdots \\ X_{\mathrm{e}100}^1(t) \end{pmatrix},$$

$$X_{\mathrm{e}}^2(t) = \begin{pmatrix} X_{\mathrm{e}1}^2(t) \\ X_{\mathrm{e}2}^2(t) \\ X_{\mathrm{e}3}^2(t) \end{pmatrix} \quad \text{and} \quad X_{\mathrm{e}}^3(t) = \begin{pmatrix} X_{\mathrm{e}1}^3(t) \\ \vdots \\ X_{\mathrm{e}99}^3(t) \end{pmatrix}$$

are respectively the state estimates of the vector states $X^1(t)$,

$$\begin{pmatrix} X^2(t) \\ \Delta T_{\mathrm{ad}}(t) \\ \zeta(t) \end{pmatrix}$$

and $X^3(t)$. $\Delta T_{\mathrm{ad}}(t)$ and $\zeta(t)$ are given in (8).

The output measurements are denoted by $y_1(t) = X_1^1(t) = T_{\mathrm{s}}(x_1, t)$, $y_2(t) = X_1^2(t) = T_{\mathrm{s}}(x_{101}, t)$ and $y_3(t) = X_{99}^3(t) = T_{\mathrm{s}}(x_{200}, t)$. With these notations, the high-gain observer takes the following structure:

$$\begin{cases} \dot{X}_{\mathrm{e}}^1(t) = A^1(\alpha(t))X_{\mathrm{e}}^1(t) + G^1(\alpha(t))y^2(t) + d^1(\alpha(t))T_0(t) + L^1(\alpha(t))(X_{\mathrm{e}1}^1 - y_1(t)) \\ \dot{X}_{\mathrm{e}}^2(t) = \tilde{A}^2(\alpha(t))X_{\mathrm{e}}^2(t) + G_1^2(\alpha(t))X_{\mathrm{e}100}^1(t) + G_2^2(\alpha(t))X_{\mathrm{e}1}^3(t) + L^2(\alpha(t))(X_{\mathrm{e}1}^2 - y_2(t)) \\ \dot{X}_{\mathrm{e}}^3(t) = A^3(\alpha(t))X_{\mathrm{e}}^3(t) + G^3(\alpha(t))y_2(t) + B^3(\alpha(t))Q_j(t) + d_1^3(\alpha(t))X_{\mathrm{e}2}^2(t) + d_2^3(\alpha(t))T_0(t) + L^3(\alpha(t))(X_{\mathrm{e}99}^3 - y_3(t)) \end{cases} \tag{9}$$

The matrices A^1, $\tilde{A}^2$ and A^3 and the observer gains L^1, L^2 and L^3 are given in Appendix A. This observer has been experimentally validated (Edouard et al., 2004): it gives a satisfactory estimation of both the temperature profile and inlet concentration (even when very stochastic variations (see Fig. 2) occur). This observer is used here in both control strategies: to estimate the state required by the LQR and to estimate the input disturbance $\Delta T_{\mathrm{ad}}(t)$ required in the MPC.

4. Model based control strategies of the RFR

According to the operating conditions, various problematic behaviours can take place during the operation of the RFR:

- When the feed of pollutant concentration is too rich, the release of heat due to the reaction produces thermal overheating that deteriorates the catalysts. The temperature inside the reactor has therefore to be maintained under the

maximum temperature specified as 600 K (Ramdani et al., 2001).

- If the feed of pollutant concentration is too lean, low heat released during the reaction leads to the extinction of the reactor. The temperature inside the reactor has therefore to be maintained over the lowest temperature specified as 450 K (Ramdani et al., 2001).
- Ideal operation of such reactor is finally an operation without control. This is possible when the feed concentration is such that the reaction temperature falls within an envelope outlined by the two previous boundary temperatures. This ideal case is called autothermal operation and no control action is required.

Except for the autothermal case, the controller to design has to compensate the influence of the input disturbance ΔT_{ad} while preserving the stability of the system. On the other side, most of the reaction takes place at the inlet of the catalytic monoliths and is instantaneous (Nieken et al., 1995a,b; Ramdani et al., 2001). Therefore, instead of the full temperature profile, only $T_s(x_{101}, t)$ has to be maintained between 450 and 600 K. Concerning the input disturbance, ΔT_{ad} varies between 0 and 30 K in real industrial use. But in order to prevent any accident, worst cases have to be evaluated. The equivalent concentration ΔT_{ad} is therefore assumed to vary randomly between 0 and 115 K (Fig. 2) and if no control is applied to the RFR, the hot-spot temperature cannot be maintained between both temperature limits (450 and 600 K) (Fig. 3). This clearly justifies the need for closed-loop control.

4.1. Overview of RFR control

Different reactor configurations of RFR have been proposed to provide efficient means of temperature control (Nieken et al., 1995b). For rich feed, one can use cold gas injection, hot gas withdrawing, or heat recovery through internal heat exchangers to suppress temperature run-away; while for lean feed, hot gas supply, or internal heating can be applied to prevent extinction (Cunill, Van de Beld, & Westerterp, 1997). Nieken et al. (1995a) demonstrated that structured packing with catalytic, less thermal conductive inert part and more thermal conductive outer part is more effective to reduce the maximum temperature than hot gas withdrawal. It is also efficient to prevent early extinction by ensuring an efficient heat exchange between feed and effluent. The first complete study on RFR control has been written by Budman, Kzyonsek, and Silverston (1996). In this paper, a parametric study of the reactor allows characterizing the operating use of the reactor with respect to two manipulated variables: the coolant flow rate and the cycle time. Moreover, Budman et al. developed two SISO control approaches (coolant flow rate is the manipulated variable) in the case where temperature and concentration at the reactor inlet where assumed to be constant input disturbances. First, a PID controller, based on a local linear model, is given. Secondly, a feed forward controller is given but it is not usable during transient conditions and it is not robust with respect to modelling errors. Cittadini, Vanni, Barresi, and Baldi (2001)gives some guidelines for the control of such process accounting for auto thermal and overheating phenomena. Recently, to avoid extinction and overheating, Keith (2003) proposed a simple switching control law strategy by on-line tuning of the switching time. In our previous work (Dufour, Couenne, et al., 2003), SISO control strategy was developed to minimize the consumption of electrical power accounting for the constraint dealing with limitation of pollutant released at the process outlet. Limitation of this strategy was concerned with the impossibilities to control overheating and to handle relatively strong stochastic variations of the inlet concentration, which is addressed here.

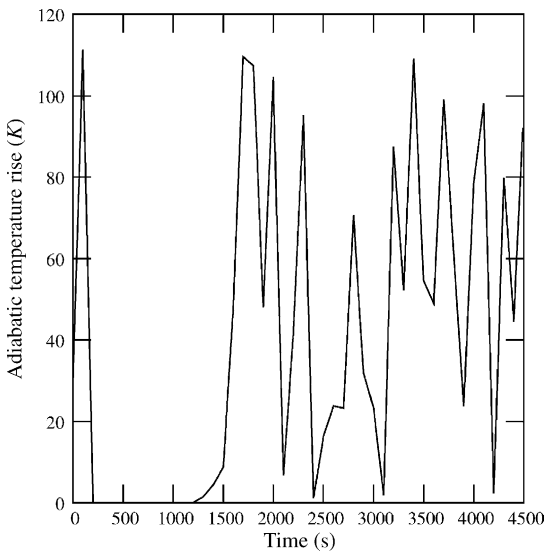

Fig. 2. Input disturbance.

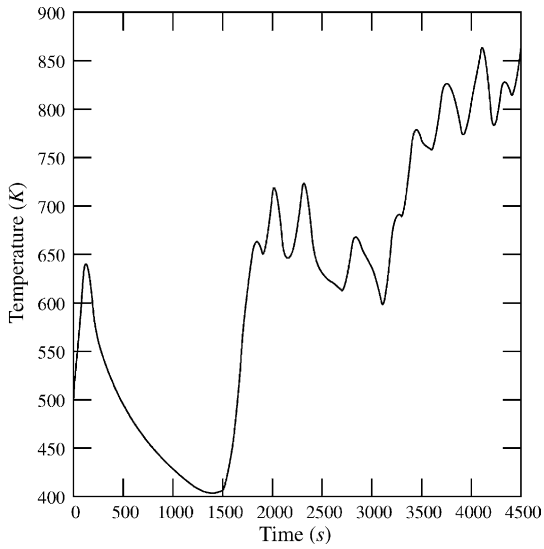

Fig. 3. Hot spot temperature without control.

4.2. LQR formulation

The above control strategies are each based on a linear model obtained from the linearization of the nonlinear system (7) around a nominal steady state that we will define below. Obviously, the choice of the steady state around which the system is linearized is important for the control performance. Based on this remark, the nominal steady states can be calculated by solving the algebraic linear equation corresponding to (7) in which $\dot{X}^i = 0$. We proceed as follows:

- At the lower limit, we take the following values: $\Delta T_{\text{ad}}^0 = 0\,\text{K}$, $\alpha^0 = 0.95$, $T_{\text{s}}^0(x_{101}) = 450\,\text{K}$. We deduce $Q_j^0 = 500\,\text{W}$ and the steady state profile Z^0 (see Fig. 4).

$$Z^0 = \begin{pmatrix} Z^{10} \\ Z^{20} \\ Z^{30} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} X^{10} \\ X^{20} \\ X^{30} \end{pmatrix}$$

- Similarly, at the higher limit: $\Delta T_{\text{ad}}^1 = 115\,\text{K}$, $T_{\text{s}}^1(x_{101}) = 600\,\text{K}$, $Q_j^1 = 0\,\text{W}$. We deduce $\alpha^1 = 0.75$ and the corresponding steady state profile Z^1 (see Fig. 4).

$$Z^1 = \begin{pmatrix} Z^{11} \\ Z^{21} \\ Z^{31} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} X^{11} \\ X^{21} \\ X^{31} \end{pmatrix}$$

Both systems are summarized in the following fashion:

$$\begin{cases} \Delta\dot{X}^1(t) = A^1(\alpha^i)\Delta X^1(t) + \left.\dfrac{\partial A^1(\alpha)}{\partial\alpha}\right|_{\alpha^i} Z^{1i}\Delta\alpha + G^1(\alpha^i)\Delta X_1^2(t) + \left.\dfrac{\partial G^1(\alpha)}{\partial\alpha}\right|_{\alpha^i} Z^{2i}\Delta\alpha + \left.\dfrac{\partial d^1(\alpha)}{\partial\alpha}\right|_{\alpha^i} T_0(t)\Delta\alpha \\ \Delta\dot{X}^2(t) = A^2(\alpha^i)\Delta X^2(t) + \left.\dfrac{\partial A^2(\alpha)}{\partial\alpha}\right|_{\alpha^i} Z^{2i}\Delta\alpha + G_1^2(\alpha^i)\Delta X_{100}^1(t) + G_2^2(\alpha^i)\Delta X_1^3(t) + \left.\dfrac{\partial G_1^2(\alpha)}{\partial\alpha}\right|_{\alpha^i} Z_{100}^{1i}\Delta\alpha + \left.\dfrac{\partial G_2^2(\alpha)}{\partial\alpha}\right|_{\alpha^i} \\ \qquad \times Z_1^{3i}\Delta\alpha + \left.\dfrac{\partial d^2(\alpha)}{\partial\alpha}\right|_{\alpha^i} \Delta T_{\text{ad}}^i\Delta\alpha + d^2(\alpha^i)\Delta\Delta T_{\text{ad}}(t) \\ \Delta\dot{X}^3(t) = A^3(\alpha^i)\Delta X^3(t) + \left.\dfrac{\partial A^3(\alpha)}{\partial\alpha}\right|_{\alpha^i} Z^{3i}\Delta\alpha + G^3(\alpha^i)\Delta X^2(t) + \left.\dfrac{\partial G^3(\alpha)}{\partial\alpha}\right|_{\alpha^i} Z^{2i}\Delta\alpha + \left.\dfrac{\partial B^3(\alpha)}{\partial\alpha}\right|_{\alpha^i} Q_j^i\Delta\alpha \\ \qquad + B^3(\alpha^i)\Delta Q_j + \left.\dfrac{\partial d_1^3(\alpha)}{\partial\alpha}\right|_{\alpha^i} \Delta T_{\text{ad}}^i\Delta\alpha + \left.\dfrac{\partial d_2^3(\alpha)}{\partial\alpha}\right|_{\alpha^i} T_0(t)\Delta\alpha + d_1^3(\alpha^i)\Delta\Delta T_{\text{ad}}(t) \end{cases} \tag{10}$$

where $\Delta X^j = X^j - Z^{ji}$ with $j = 1, 2, 3$ and $i = 0$ or 1. The above linearization is achieved around each steady state

$$Z^i = \begin{pmatrix} Z^{1i} \\ Z^{2i} \\ Z^{3i} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} X^{1i} \\ X^{2i} \\ X^{3i} \end{pmatrix}$$

with, $i = 0, 1$.

Both systems are summarized as:

$$\Delta\dot{X}(t) = A(\alpha^i)\Delta X(t) + B_1^i\Delta\alpha(t) + B_2^i\Delta Q_j(t) \tag{11}$$

Remark 4.1. A discussion often arises at this point: what is the need to develop an accurate and complex nonlinear model (like here) if a linearized model is finally used for the control synthesis? It is known that the advantage is that the on-line computational effort is less important, while the drawbacks are the linearization errors. In the case of the RFR, the linearization errors around the nominal steady state have been shown to be not very important: indeed, the accurate nonlinear model (1)–(5) is a nonlinear model with respect to the input, but a linear model with respect to the state. Therefore, errors due to the linearization are very reasonable.

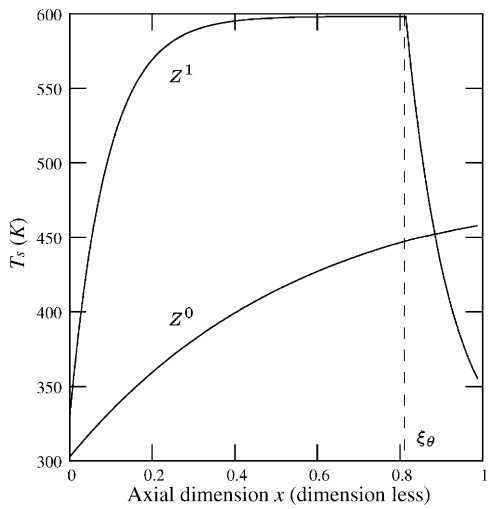

Fig. 4. LQR: nominal temperature profiles in high and low temperature operations.

The LQR control aims binding the catalytic temperature in the optimal operating conditions defined by the temperature envelope. Therefore, two cost functions are considered, which allows diagonalizing the system. Indeed, it seems natural to avoid both heating and cooling together. With this linear system, the control strategy is defined by the two following cost functions:

- When the pollutant concentration is too low, the controller aims to tune the internal heating power such that the temperature is kept over a lower bound threshold. In the LQR strategy, this aims to minimize the following cost:

$$\int_0^\infty (p_1^0(\Delta X^2(t))^2 + p_2^0(\Delta Q_j(t))^2)\,\text{d}t \tag{12}$$

- When the pollutant concentration is too high, the controller aims to tune the fresh air dilution such that the temperature is kept below an upper bound threshold. In the LQR strategy, this aims to minimize the following cost:

$$\int_0^\infty (p_1^1(\Delta X^2(t))^2 + p_2^1(\Delta\alpha(t))^2)\,\mathrm{d}t \tag{13}$$

In both cases, the control obtained from the minimization of these cost functions is a linear feedback of the form $\Delta Q_j(t) = -F^0\Delta X$ or $\Delta\alpha(t) = -F^1\Delta X$ with $\Delta X = X_e(t) - Z^i$ where $(i = 0, 1)$ and $X_e(t)$ is the estimate state given by the observer. The gains of the feedback matrix are obtained from the solution of the classical algebraic Riccati equation:

$$\begin{cases} F^0 = (p_2^0)^{-1}(B_2^0)^T S^0 \\ S^0 A(\alpha^0) + (A(\alpha^0))^T S^0 + C^T C - S^0 B_2^0 (p_2^0)^{-1} \\ \quad \times (B_2^0)^T S^0 = 0 \\ F^1 = (p_2^1)^{-1}(B_1^1)^T S^1 \\ S^1 A(\alpha^1) + (A(\alpha^1))^T S^1 + C^T C - S^1 B_1^1 (p_2^1)^{-1} \\ \quad \times (B_1^1)^T S^1 = 0 \end{cases} \tag{14}$$

where $C = [C_1 \cdots C_{100}\ C_{101} \cdots C_{200}]$ with $[C_1 \cdots C_{100}] = [0 \cdots 0]$ and $[C_{101} \cdots C_{200}] = [1\,0 \cdots 0]$.

4.3. MPC formulation

From a practical point of view, one of the drawbacks of the MPC is the computational time aspect, especially when the model becomes more complex and more accurate, like the model of the RFR model presented here. Indeed, the model is intended to predict the future dynamic behaviour of the process output over a finite prediction horizon and has to be solved during the on-line constrained optimization problem resolution. The method used here to reduce this computational time (Dufour, Touré, et al., 2003)is now reminded. The idea is to use two models on-line: the nonlinear parabolic PDE model (1)–(5) solved off-line combined with a linearized time-varying PDE model (11) solved on-line during the optimization task. The use of the IMC structure allows using less accurate (hence less time consuming) finite dimensional approximation of the linearized time-varying PDE model (11) hence introducing robustness with respect to model approximation (Dufour & Touré, 2004). Indeed, for the model approximation, two tuning strategies are possible for the number of nodes used in the finite difference method: First possibility, the number of nodes is tuned to a "small" value ("small" with respect to the large number of nodes to find an accurate approximation of the nonlinear parabolic PDE system solution). In this case, less time is required for the model resolution and more time can be spent for the optimization task. But since the MPC formulation is an open loop predictive optimization procedure, large errors due to the PDE model solution approximation used in the optimization task may degrade closed-loop control results. The second possibility for the tuning is to increase the number of nodes to find a more accurate approximated solution of the PDE system. This leads to increase the time needed to solve the model and to decrease the time dedicated to the optimization task resolution. The drawback is that the optimizer may not have the time to find a solution during the sampling time. Clearly speaking, a trade-off exists for this tuning: even if it leads to a loss of accuracy in open loop input output behaviour, it allows reaching the closed-loop performances specified while providing a less time-consuming resolution task (Dufour & Touré, 2004).

Here, two types of constraints are handled: hard constraints are those who should never be violated while soft constraints may sometimes be violated (Qin & Badgwell, 2003). Hard input constraints (magnitude and velocity constraints for the manipulated variables (MVs)) are handled through a transformation method: it guarantees that the actions always respect these constraints. Soft output constraints (constraints on the controlled variables (CVs)) are accounted for in an exterior penalty method (Fletcher, 1987): this allows handling for unfeasibility issue that main happened during the constrained optimization task resolution.

Finally, the control problem is formulated in the MPC framework as:

$$\begin{cases} \min\limits_{Q_j(k)},\ \alpha(k) J(Q_j(k), \alpha(k)) \\ \quad = \left(w_Q \left[\dfrac{Q_j(k) - Q_{j\,\min}}{Q_{j\,\max} - Q_{j\,\min}} \right]^2 + w_\alpha \left[\dfrac{\alpha(k) - \alpha_{\max}}{\alpha_{\max} - \alpha_{\min}} \right]^2 \right) \\ \text{with constraints on MVs magnitude:} \\ Q_{j\,\min} \le Q_j(j) \le Q_{j\,\max} \quad \forall j \in J_0^{h_p - 1} \\ \quad = \{k, k + h_p - 1\} \\ \alpha_{\min} < \alpha(j) \le \alpha_{\max} \quad \forall j \in J_0^{h_p - 1} \\ \text{with two constraints on the CVs:} \\ T_{s\,\min} \le T_s(x_{101}, j) \quad (\text{with } j \in \{k + \mathrm{hp}_1^{\mathrm{i}}, k + \mathrm{hp}_1^{\mathrm{f}}\}) \\ T_s(x_{101}, j) \le T_{s.\max} \quad (\text{with } j \in \{k + \mathrm{hp}_2^{\mathrm{i}}, k + \mathrm{hp}_2^{\mathrm{f}}\}) \end{cases} \tag{15}$$

where k is the actual discrete time index, j is the discrete time index. The tuning parameters are the horizons: $\mathrm{hp}_1^{\mathrm{i}}$ and $\mathrm{hp}_1^{\mathrm{f}}$ (resp. $\mathrm{hp}_2^{\mathrm{i}}$ and $\mathrm{hp}_2^{\mathrm{f}}$) are the initial and future prediction horizons describing the lower (resp. upper) temperature constraint whereas $h_p = \max(\mathrm{hp}_1^{\mathrm{f}}, \mathrm{hp}_2^{\mathrm{f}})$. w_Q and w_α are positive weights. In the meantime, in order to decrease the computational burden, the tuning of the control horizon is one. Even if it is true that this tuning reduces strongly the degrees of freedom to solve the optimization problem, it allows decreasing the computational time, which is an important issue here. Indeed, the control horizon is the number of arguments that characterizes the sequence of future control moves involved in the optimization task: the closed-loop performances improve when the control horizon increases but at the expense of increasing the computational burden (Qin & Badgwell, 2003).

5. Simulation results

5.1. LQR

By use of the observer, full states of the system can be estimated in real time, which makes implementation of LQR possible. For the LQR control, we have: $-\Delta\alpha(t) = -F^1\Delta X$ and $\Delta Q_j(t) = -F^0\Delta X(t)$ with $\Delta X(t) = X_e(t) - Z^i(t)$ (where $X_e(t)$ is the estimated state).

Since the feedback gain can be determined off-line, the time used to compute control actions online is negligible. The weights are tuned as follows: $P_1^0 = P_1^1 = 1$, $P_2^0 = 5 \times 10^{-4}$ and $P_2^1 = 500$. Simulations results show that, in spite of the steep changes in feed concentration (Fig. 2), the temperature at the inlet of catalytic zone is tightly controlled between the two limits (Fig. 5). The LQR correctly tune both manipulated variables: indeed, between 500 and 1550 s, the lean feed leads to decrease the temperature inside the reactor. LQR tunes the internal heating (Fig. 6) to a value needed to keep the temperature above the extinction temperature. In the meantime, no dilution is taking place (Fig. 7). After 1550 s, rich feed induces an increase of temperature inside the reactor. LQR tunes the dilution rate (Fig. 7) such that the temperature is maintained below the maximum temperature (Fig. 5). There is no heating (Fig. 6). At the end of the run, the average of electrical power Q_j is 83.4 W, the average of dilution rate $\bar{\alpha}$ is 0.894, whereas constraints are always satisfied.

5.2. MPC

Simulation runs are now discussed for the use of the proposed MPC strategy. They allow seeing different closed-loop behaviours according to:

- the tuning of the controller, i.e. the two initial receding horizons and the two final horizons;
- the use of the observer into the control loop.

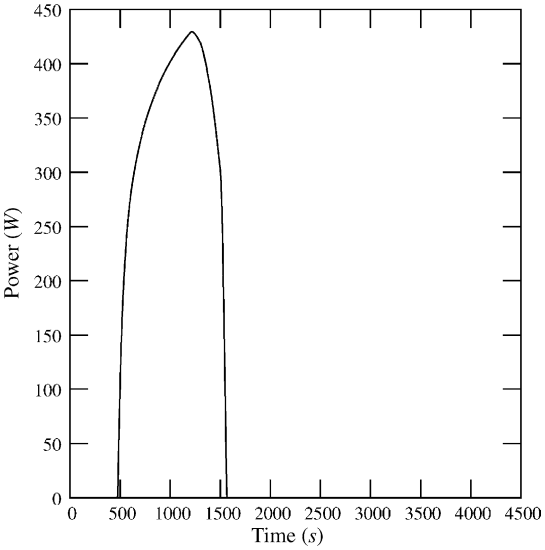

Fig. 6. LQR: heating power.

5.2.1. Tuning of the controller

It is clear that the tuning of the controller parameters directly influences the constrained optimization problem and therefore closed-loop control results. Moreover, this constrained optimization problem uses the estimation of the input disturbance (the adiabatic temperature rise ΔT_{ad}) which has an evident impact over the closed-loop performances (especially the constraints satisfaction). Regarding the impact of the input disturbance over the optimization task and the constraints satisfaction required, some guidelines for the tuning of the controller parameters are first given in the Table 1.

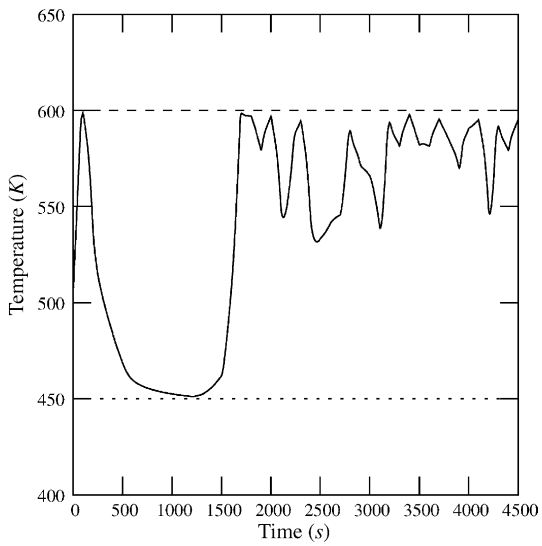

Fig. 5. LQR: hot spot temperature.

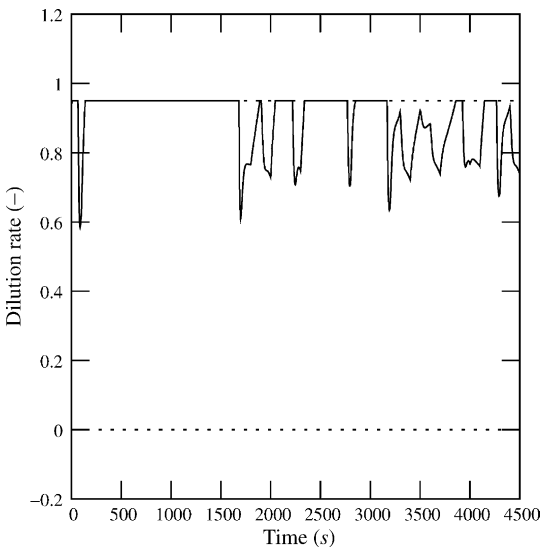

Fig. 7. LQR: dilution rate.

Table 1
Guidelines for the tuning of the initial and final prediction horizons

	Impact of ΔT_{ad} during the optimization task according to . . .	Constraints satisfaction during the optimization task according to . . .
. . . the tuning of the initial horizon prediction	If some constraints are currently saturated, they may no more be satisfied in the very close future due to possible strong variations of ΔT_{ad}. Conclusion: the smallest initial prediction horizon is required.	The cooling action creates a non-minimum phase behaviour in the temperature involved in output constraints. Therefore, initial prediction horizon has to be tuned sufficiently large such that this behaviour is not accounted for into the controller, especially when constraints are saturated. Conclusion: a sufficiently large initial prediction horizon is required.
. . . the tuning of the final horizon prediction	Since ΔT_{ad} is used in the prediction framework, is strongly stochastic and has a large impact over closed-loop performances, large prediction horizons will forecast an uncertain future. Conclusion: the smallest final prediction horizon is required.	The dynamic of the temperature involved in the output constraints is relatively low and has to be accounted for into the constrained optimization problem. Conclusion: a sufficiently large final prediction horizon is required.

It clearly underlines that the tuning will be uneasy due to the impact of the input disturbance over the closed-loop performances and due to the non minimum phase behaviour of the temperature as well. Indeed, according to the tuning of the manipulated variables, the temperature inside the reactor may feature a non-minimum phase behaviour, as it can be seen in Fig. 8: it depicts the evolution in time of the sensitivity of the temperature with respect to the dilution rate at two different locations in the reactor. The reason of this non minimum phase behaviour is not clear for the moment. But one can see that when the dilution action is increased, two phenomena occur: first, as expected, the action of dilution allows decreasing the temperature inside the reactor (the sensitivity takes positive final values). In the meantime, the flow rate inside the thermal monolith is decreased hence increasing heat exchange between the gas and the solid part (the sensitivity takes negative values). Therefore, before the expected influence of dilution action appears, dilution action is acting as a heating action.

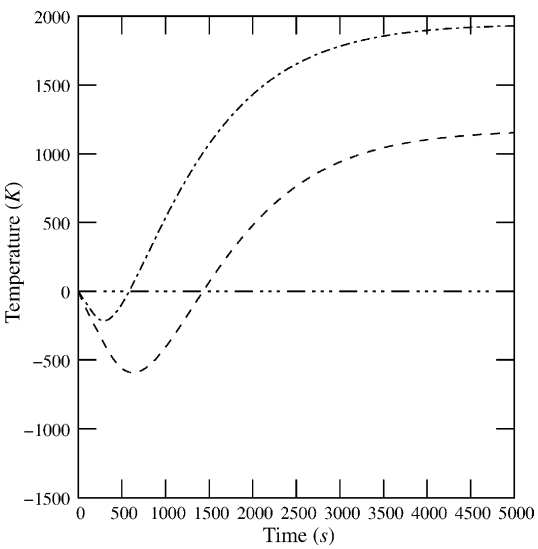

Fig. 8. Time evolution of two distributed sensitivities of the temperature with respect to the dilution rate.

5.2.2. Correct tuning of the controller

In run #778, the tuning of the controller parameter are the following one:

$$\mathrm{hp}_1^{\mathrm{i}} = 2, \quad \mathrm{hp}_1^{\mathrm{f}} = 4, \quad \mathrm{hp}_2^{\mathrm{i}} = 1, \quad \mathrm{hp}_2^{\mathrm{f}} = 12 \tag{16}$$

In this run, one assumes that the estimation of the input disturbance ΔT_{ad} (Fig. 2) is fed into the controller. This run shows that this controller's tuning allow to satisfy the constraints at any time (Fig. 9), which is the most important point required by the constrained optimization problem. One can see two different time intervals:

- For $0 < t < 1300$ s, ΔT_{ad} is small (Fig. 2) and extinction of the process is avoided feeding electrical power into the reactor (Fig. 10). In the meantime, there is no cooling action (except a peak at the beginning) and the maximum amount of gas is therefore treated (Fig. 11) as expected in these conditions.
- When $t > 1500$ s, ΔT_{ad} becomes important and overheating of the process is avoided (see the upper bound constraint on Fig. 9) due to the correct use of cooling action (Fig. 11). The drawback is that the controller may sometimes require both heating and cooling actions at the same time (Figs. 10 and 11), which should not happen: optimization should be improved to avoid this issue.

5.2.3. Bad tuning of the controller

In the previous simulation, constraints were always satisfied. In the meantime, cooling and heating action were sometimes acting at the same time, which should not happened with the RFR. Therefore, in order to improve the tuning of the control actions, the controller parameters were retuned as follow in run #787 accounting for the remarks made in Table 1:

$$\mathrm{hp}_1^{\mathrm{i}} = 1, \quad \mathrm{hp}_1^{\mathrm{f}} = 3, \quad \mathrm{hp}_2^{\mathrm{i}} = 8, \quad \mathrm{hp}_2^{\mathrm{f}} = 8 \tag{17}$$

In this run, one assumes that the estimation of the input disturbance ΔT_{ad} (Fig. 2) is fed into the controller. The most important changes between runs #787 and #778 is dealing with $\mathrm{hp}_2^{\mathrm{i}}$. Its tuning allows accounting more correctly for the

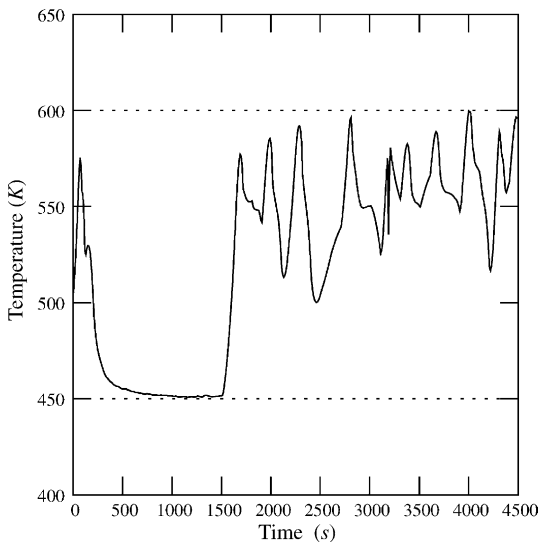

Fig. 9. MPC, run #778: hot spot temperature.

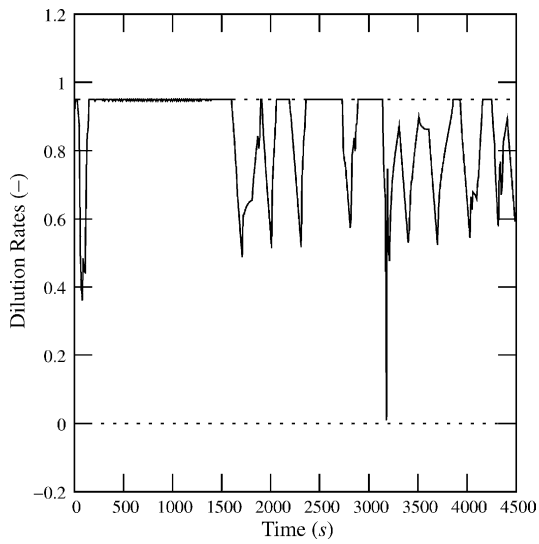

Fig. 11. MPC, run #778: dilution rate.

temperature's NMP behaviour: both cooling and heating are not acting at the same time after 1500 s (Figs. 13 and 14). The NMP behaviour is much less influencing the optimization task. But the drawback of such tuning is evident over the constraints (Fig. 12): as predicted in Table 1, the temperature is going beyond the maximum threshold due to the strong impact of ΔT_{ad} and since near future time is no more accounted for into the constrained optimization task. Therefore, the controller reacts only after constraint's violation.

5.2.4. Comparison of the two previous tunings of the controller

Finally, even if the rules given in Table 1 are very important to correctly tune the controller, the MPC tuning is clearly an uneasy task. For such process, the MPC may be tuned according to two different strategies:

- run #787: the output constraints may not be satisfied at any time (soft constraints): this leads the controller to a correct decoupling of the two actions while the output constraints are not always satisfied.
- run #778: the output constraints have to be satisfied at any time (hard constraints): this leads the controller to tune both actions such that the output constraints are always satisfied while the two actions may sometimes act at the same time.

Here, run #778, even if leading to less interesting results than run #787 in term on control actions, features the best controller tuning for this constrained control problem which is very sensitive with respect to the stochastic input disturbance ΔT_{ad}. At the end of the run #778, overall optimization is interesting: the average of electrical power $\bar{Q}_j$ is 274.6 W,

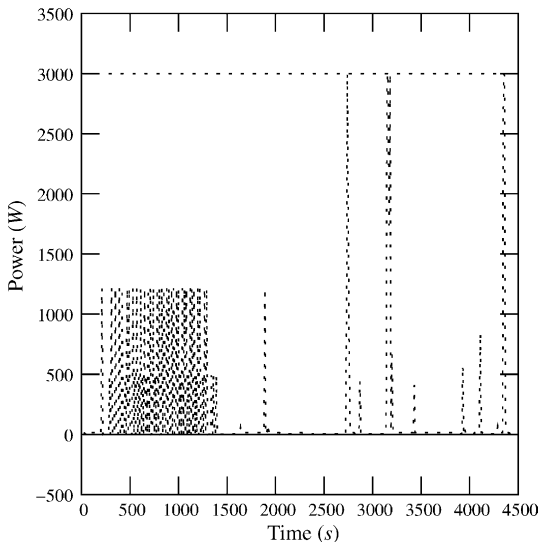

Fig. 10. MPC, run #778: heating power.

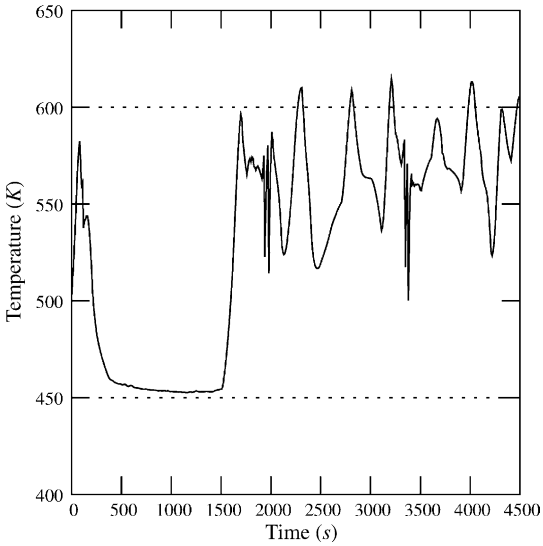

Fig. 12. MPC, run #787: hot spot temperature.

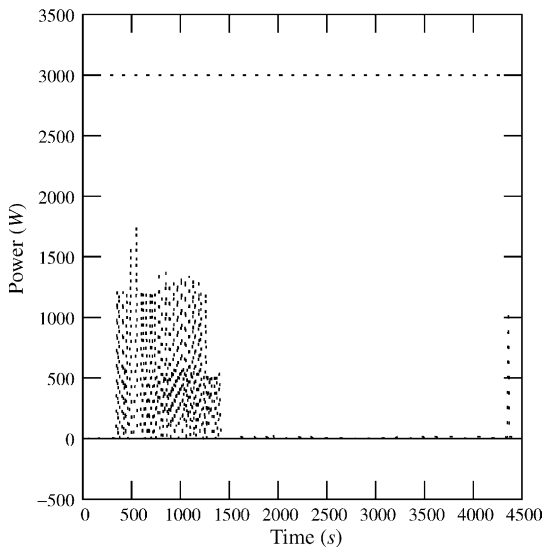

Fig. 13. MPC, run #787: heating power.

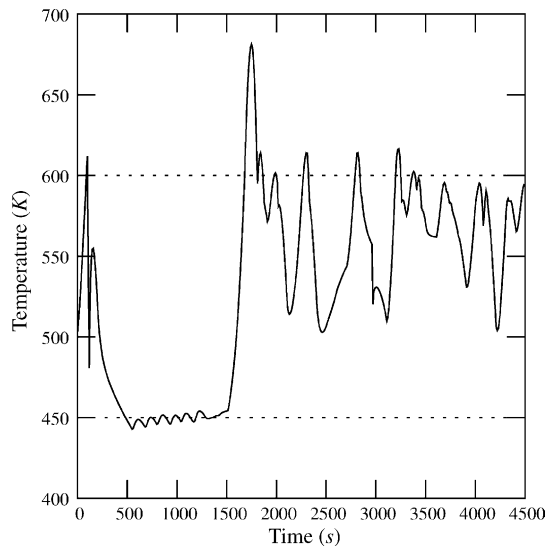

Fig. 15. MPC, run #798: hot spot temperature.

the average of dilution rate $\bar{\alpha}$ is 0.849, whereas constraints are always satisfied.

5.2.5. Need for the observer

Previous runs are assuming that the measure of the stochastic input disturbance ΔT_{ad} is available. One present here results obtained in run #798, which is similar to run #778, but where no estimation of ΔT_{ad} is used by the controller. It clearly shows the strong need for the use of the observer since both output constraints are not always satisfied (Fig. 15). This also clearly underlines, as expected, the strong impact of the stochastic input disturbance over closed-loop control results and the difficulty to handle it in the optimization task.

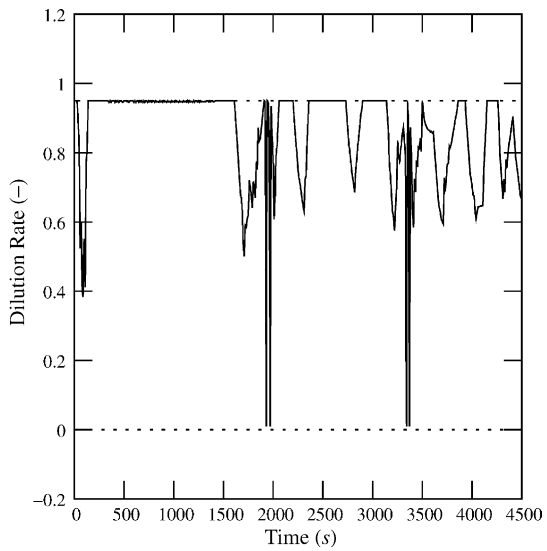

Fig. 14. MPC, run #787: dilution rate.

5.3. Comparison between LQR and MPC results

With both control strategies, the temperature can be maintained into the specified temperature envelope, in spite of large input disturbance due to the feed concentration. Concerning the optimization performances, LQR leads to better results than MPC: $\bar{Q}_j = 83.4\,\text{W}$ and $\bar{\alpha} = 0.894$ for LQR, $\bar{Q}_j = 274.6\,\text{W}$ and $\bar{\alpha} = 0.849$ for MPC. LQR is therefore more interesting since it requires less heating action while treating more gas. This difference is mostly due to the impact of the stochastic variations of the input disturbance over MPC. Indeed, the estimation of the disturbance ΔT_{ad} is directly used in the MPC, where it is assumed constant in the future. This forces the MPC to over evaluate the need for heating and cooling. In the meantime, such assumption is not required by the LQR which makes it more interesting for control purpose, even if the estimation of ΔT_{ad} is not directly used by the LQR. In the meantime, a switching control structure is used for the LQR: therefore, heating and cooling action are decoupled and cannot acting at the same time as expected. The drawback is that it introduces a severe nonlinearity for stability analysis. Concerning the MPC approach, most of the time, cooling and heating are not acting at the same time. But due to the large impact of the input disturbance, due to the non minimum phase behaviour of the process, due to the prediction aspect and due to the uneasy task of horizons tuning, heating and cooling actions may be sometimes required at the same time. This is clearly an unexpected behaviour which degrades the closed-loop performance. In the meantime, the proposed MPC approach is a general framework for multivariable control problem whereas the LQR assumes decoupling. Moreover, constraints are explicitly accounted for in the MPC formulation whereas they are handled in a logical decision level in the LQR.

6. Conclusion

This paper is dealing with the performances comparison of two multivariable observer based controllers of a catalytic RFR used to decrease noxious VOC amount released in the atmosphere. The complexity of this process includes distributed aspect, nonlinear dynamic behaviour and periodic reversing of the circulation of gas. Until now, very few papers have dealt with the control of such process, especially the multivariable optimal control. In this paper, we compare a LQR and a MPC both based on a high-gain observer. The new key control issue tackled here is to confine the hot spot temperature within two temperature limits, in order to ensure complete conversion of the pollutant and to prevent catalyst overheating, while optimizing the control actions. In spite of a large input disturbance due to the stochastic variations of the feed concentration, both observer based controllers are very robust since the temperature can be maintained inside the specified temperature envelope. The controlled RFR may therefore be used under various operating conditions, which is very interesting for the industrial use. Since the LQR directly uses the state estimation (whereas the MPC directly uses the input disturbance estimation), the large input disturbance has less impact over LQR performances than MPC performances. Therefore, the LQR leads to a better optimal operation of the RFR than MPC: less heating action is required while treating more gas. In the meantime, LQR strategy is based on two decoupled optimization tasks and a logical decision level whereas MPC is based on a general multivariable optimization task where constraints are explicitly accounted for. This makes MPC more suitable for general multivariable control problems. It is also shown how the MPC tuning is an uneasy task due to the process behaviour, the optimization problem and the impact of the input disturbance.

Appendix A

A.1. Matrices expression

$$A^1(t) = \begin{pmatrix} a_4(t) & a_1(t) & 0 & \cdots & 0 \\ a_3(t) & a_2(t) & a_1(t) & & \vdots \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & & \ddots & \ddots & a_1(t) \\ 0 & \cdots & 0 & a_3(t) & a_2(t) \end{pmatrix},$$

$$A^2(t) = a_{2c}(t),$$

$$A^3(t) = \begin{pmatrix} a_2(t) & a_1(t) & 0 & \cdots & 0 \\ a_3(t) & a_2(t) & a_1(t) & & \vdots \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & & \ddots & \ddots & a_1(t) \\ 0 & \cdots & 0 & a_3(t) & a_5(t) \end{pmatrix}.$$

$$d^1(t) = \begin{pmatrix} b_1(t) \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}, \quad d^2(t) = r(t), \text{ with } r(t) = \frac{P_\theta \psi(x_{101})}{\tau},$$

$$d_1^3(t) = \begin{pmatrix} \dfrac{P_\theta \psi(x_{102})}{\tau} \\ \dfrac{P_\theta \psi(x_{103})}{\tau} \\ \vdots \\ \dfrac{P_\theta \psi(x_{200})}{\tau} \end{pmatrix}, \quad d_2^3(t) = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \vdots \\ b_2(t) \end{pmatrix}.$$

$$G^1(t) = \begin{pmatrix} 0 \\ \vdots \\ a_1(t) \end{pmatrix}, \quad G_1^2(t) = a_{3c}(t), \quad G_2^2(t) = a_1(t)$$

$$G^3(t) = \begin{pmatrix} a_3(t) \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}, \quad B^3(t) = \begin{pmatrix} 0 \\ \vdots \\ b_3(t) \end{pmatrix}.$$

The coefficients a_i, a_{ic} and b_i are given by:

$$a_1(t) = \frac{\lambda_{\text{eff1}}(t)}{(\delta x_k)^2}, \quad a_2(t) = -2\frac{\lambda_{\text{eff1}}(t)}{(\delta x_k)^2} + \frac{D(t)}{\delta x_k},$$

$$a_3(t) = \frac{\lambda_{\text{eff1}}(t)}{(\delta x_k)^2} - \frac{D(t)}{\delta x_k},$$

$$a_4(t) = a_2(t) + a_3(t)\frac{\alpha(t)}{P_\theta \delta x_1}\frac{1}{1 + (\alpha(t)/P_\theta \delta x_1)},$$

$$a_5(t) = a_2(t) + a_1(t)\frac{1 + N' + \alpha^2(t)}{P_\theta \delta x_2} \times \frac{1}{(1 + N')(1 + (1/P_\theta \delta x_2)) + (\alpha^2(t)/P_\theta \delta x_2) - \alpha(t)}.$$

and

$$a_{2c}(t) = (\delta x_1 + \delta x_2)\frac{\lambda_{\text{eff1}}(t)}{\delta x_1 (\delta x_2)^2} + \frac{D(t)}{\delta x_1},$$

$$a_{3c}(t) = \frac{\lambda_{\text{eff1}}(t)}{(\delta x_1)(\delta x_2)} - \frac{D(t)}{\delta x_1},$$

$$b_1(t) = a_3(t)\frac{1}{1+(\alpha(t)/P_\theta \delta x_1)},$$

$$b_2(t) = a_1(t) \times \frac{1+N'-\alpha(t)}{(1+N')(1+(1/P_\theta\delta x_2))+(\alpha^2(t)/P_\theta\delta x_2)-\alpha(t)}$$

and

$$b_3(t) = a_1\frac{1}{\rho_0 u_{v_0} c_{\text{pmg}} S} \times \frac{1}{(1+N')(1+(1/P_\theta\delta x_2))+(\alpha^2(t)/P_\theta\delta x_2)-\alpha(t)}$$

with

$$D(t) = \frac{1-\alpha(t)}{2\tau}, \quad \lambda_{\text{eff1}}(t) = \frac{1}{\tau P_{ax\theta}} + \frac{1+\alpha^2(t)}{2P_\theta\tau}$$

and $\delta x_k = \delta x_1 = 8.3651 \times 10^{-3}$ for $k = 1$ (inert monolith), $\delta x_k = \delta x_2 = 1.5513 \times 10^{-3}$ for $k = 2$ (catalytic monolith).

A.2. Gain expression

$$L^1(t) = a_1(t)\Theta_1 K^1, \quad L^2(t) = \Lambda(t)\Theta_2 K^2 \quad \text{and}$$
$$L^3(t) = a_3(t)\Theta_3 K^3 J$$

where

$$K^1 = \begin{pmatrix} K_1^1 \\ \vdots \\ K_{100}^1 \end{pmatrix}, \quad K^2 = \begin{pmatrix} K_1^2 \\ K_2^2 \\ K_3^2 \end{pmatrix} \quad \text{and} \quad K^3 = \begin{pmatrix} K_1^3 \\ \vdots \\ K_{99}^3 \end{pmatrix}$$

are such that the square matrices:

$$\bar{A}^1 = \begin{pmatrix} K_1^1 & 1 & 0 & \cdots & \cdots & 0 \\ K_2^1 & 0 & \ddots & \ddots & & \vdots \\ \vdots & \vdots & \ddots & 1 & \ddots & \vdots \\ \vdots & \vdots & & \ddots & \ddots & 0 \\ K_{99}^1 & 0 & \cdots & \cdots & 0 & 1 \\ K_{100}^1 & 0 & \cdots & \cdots & \cdots & 0 \end{pmatrix},$$

$$\bar{A}^2 = \begin{pmatrix} K_1^2 & 1 & 0 \\ K_2^2 & 0 & 1 \\ K_3^2 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad \text{and}$$

$$\bar{A}^3 = \begin{pmatrix} K_1^3 & 1 & 0 & \cdots & \cdots & 0 \\ K_2^3 & 0 & \ddots & \ddots & & \vdots \\ \vdots & \vdots & \ddots & 1 & \ddots & \vdots \\ \vdots & \vdots & & \ddots & \ddots & 0 \\ K_{99}^3 & 0 & \cdots & \cdots & 0 & 1 \\ K_{100}^3 & 0 & \cdots & \cdots & \cdots & 0 \end{pmatrix}$$

are stable (it means that the real part of the eigenvalues of the $\bar{A}^i$s are negative).

Θ_i are given by:

$$\Theta_1 = \begin{pmatrix} \Omega & 0 & \cdots & \cdots & 0 \\ 0 & \Omega^2 & \ddots & & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & \cdots & \cdots & 0 & \Omega^{100} \end{pmatrix},$$

$$\Theta_2 = \begin{pmatrix} \Omega & 0 & 0 \\ 0 & \Omega^2 & 0 \\ 0 & 0 & \Omega^3 \end{pmatrix} \quad \text{and}$$

$$\Theta_3 = \begin{pmatrix} \Omega & 0 & \cdots & \cdots & 0 \\ 0 & \Omega^2 & \ddots & & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & \cdots & \cdots & 0 & \Omega^{99} \end{pmatrix}$$

where $\Omega > 0$ is the parameter of calibration of the observer, in our case $\Omega = 3$.

Finally,

$$\Lambda(t) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{r(t)} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{r(t)} \end{pmatrix}, \quad \tilde{A}^2 = \begin{pmatrix} 0 & r(t) & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad \text{and}$$

$$J = \begin{pmatrix} 0 & \cdots & 0 & 0 & 1 \\ 0 & \cdots & 0 & 1 & 0 \\ 0 & \cdots & 1 & 0 & 0 \\ \vdots & & \cdots & \vdots & \vdots \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

References

Allgöwer, F., Badgwell, T. A., Qin, J. S., Rawlings, J. B., & Wright, S. J. (1999). Nonlinear predictive control and moving horizon estimation. In

P. M. Frank (Ed.), *Advances in control. Highlights of ECC'99*. Berlin: Springer.

Armaou, A., & Christofides, P. D. (2002). Dynamic optimization of dissipative PDE systems using nonlinear order reduction. *Chemical Engineering Science*, *57*(24), 5083–5114.

Balakotaiah, V., & Dommeti, S. M. S. (1999). Effective models for packed-bed catalytic reactors. *Chemical Engineering Science*, *54*, 1621.

Balas, M. J. (1998). Stable feedback control of linear distributed parameter systems: time and frequency domain conditions. *Journal of Mathematical Analysis and Applications*, *225*(1), 144–167.

Bornard, G., & Hammouri, H. (1991). A high-gain observer for a class of uniformly observable systems. *Proceedings of the 30th IEEE conference on decision and control*. England: Brighton.

Budman, H., Kzyonsek, M., & Silverston, P. (1996). Control of a nonadiabatic packed bed reactor under periodic flow reversal. *Canadian Journal of Chemical Engineering*, *74*, 751–759.

Christofides, P. D. (1998). Robust control of hyperbolic PDE systems. *Chemical Engineering Science*, *53*(16), 85–105.

Christofides, P. D., & Daoutidis, P. (1997). Finite-dimensional control of parabolic PDE systems using approximate inertial manifolds. *Journal of Mathematical Analysis and Applications*, *216*(2), 398–420.

Cittadini, M., Vanni, M., Barresi, A. A., & Baldi, G. (2001). Simplified procedure for design of catalytic combustors with periodic flow reversal. *Chemical Engineering and Processing*, *40*(3), 255–262.

Cunill, F., Van de Beld, L., & Westerterp, K. R. (1997). Catalytic combustion of very lean mixtures in a reverse flow reactor using an internal electrical heater. *Industrial and Engineering Chemistry Research*, *36*, 4198–4206.

Deza, F., Busvelle, E., & Gauthier, J. P. (1992). High-gain estimation for nonlinear systems. *Systems & Control Letters*, *18*, 295.

Dufour, P., Couenne, F., & Touré, Y. (2003). Model predictive control of a catalytic reverse flow reactor. *Special issue IEEE Transactions on Control Systems Technology on Control of Industrial Spatially Distributed Parameter Processes*, *11*(5), 705–714.

Dufour P., & Touré, Y. (2004). Multivariable model predictive control of a catalytic reverser flow reactor. *Computers and Chemical Engineering*, *28*(11), 2259–2270.

Dufour, P., Touré, Y., Blanc, D., & Laurent, P. (2003). On nonlinear distributed parameter model predictive control strategy: on-line calculation time reduction and application to an experimental drying process. *Computers and Chemical Engineering*, *27*(11), 1533–1542.

Eaton, J. W., & Rawlings, J. B. (1990). Feedback control of chemical processes using on-line optimization techniques. *Computers and Chemical Engineering*, *14*(4–5), 469–479.

Edouard, D., Hammouri, H., & Schweich, D. (2004). Observer design for reverse flow reactor. *AIChE Journal*, *50*(9), in press.

El-Farra, N. H., Armaou, A., & Christofides, P. D. (2003). Analysis and control of parabolic PDE systems with input constraints. *Automatica*, *39*(4), 715–725.

Farza, M., Hammouri, H., & Busavon, K. (1998). A simple observer for a class of nonlinear systems. *Applied Mathematics Letters*, *11*, 27.

Fletcher, R. (1987). *Practical methods of optimization*. John Wiley and Sons.

Gauthier, J. P., Hammouri, H., & Othman, S. (1992). A simple observer for nonlinear systems, application to bioreactors. *IEEE Transactions on Automatic Control*, *37*, 875.

Godasi, S., Karakas, A., & Palazoglu, A. (2002). Control of nonlinear distributed parameter processes using symmetry groups and invariance conditions. *Computers and Chemical Engineering*, *26*(7–8), 1023–1036.

Hoo, K. A., & Zheng, D. (2001). Low-order control-relevant models for a class of distributed parameter systems. *Chemical Engineering Science*, *56*(23), 6683–6710.

Irizarry-Rivera, R., & Seider, W. D. (1997). Model-predictive control of the Czochralski crystallization process Part I. Conduction-dominated melt. *Journal of Crystal Growth*, *178*(4), 593–611.

Keith, J. M. (2003). Controlling reverse-flow reactors via multiscale transient thermal dispersion. *Advances in Environmental Research*, *7*(2), 521–535.

Levine, W. S. (1996). *The control handbook*. CRC and IEEE Press.

Mayne, D. Q., Rawlings, J. B., Rao, C. V., & Scokaert, P. O. M. (2000). Constrained model predictive control: stability and optimality. *Automatica*, *36*(6), 789–814.

Morari, M., & Lee, J. H. (1999). Model predictive control: past, present and future. *Computers and Chemical Engineering*, *23*(4–5), 667–682.

Nieken, U., Kolios, G., & Eigenberger, G. (1995a). Control of the ignited steady state in authothermal fixed-bed reactors for catalytic combustion. *Chemical Engineering Science*, *49*(24), 5507–5518.

Nieken, U., Kolios, G., & Eigenberger, G. (1995b). Limiting cases and approximate solutions for fixed-bed reactors with periodic flow reversal. *AIChE Journal*, *41*(8), 1915–1925.

Palazoglu, A., & Karakas, A. (2000). Control of nonlinear distributed parameter systems using generalized invariants. *Automatica*, *36*(5), 697–703.

Patwardhan, A. A., Wright, G. T., & Edgar, T. F. (1992). Nonlinear model-predictive control of distributed-parameter systems. *Chemical Engineering Science*, *47*(4), 721–735.

Qin, S. J., & Badgwell, T. A. (2003). A survey of industrial model predictive control technology. *Control Engineering Practice*, *11*(7), 733–764.

Ramdani, K., Pontier, R., & Schweich, D. (2001). Reverse low reactor at short switching periods for VOC combustion. *Chemical Engineering Science*, *56*(4), 1531–1539.

Rawlings, J. B. (2000). Tutorial overview of model predictive control. *IEEE Control Systems*, *20*(3), 38–52.

Touré, Y., Biston, J., & Gilles, G. (1994). Modeling of a distributed parameter process with a variable boundary: application to its control. *Chemical Engineering Science*, *49*(1), 61–73.

Touré, Y., & Josserand, L. (1997). An extension of IMC to boundary control of distributed parameter systems. *Proceeding of the IEEE International Conference on Systems, Man and Cybernetics-CCS*, *3*, 2426–2431.

Vortmeyer, D., & Schaefer, R. J. (1974). Equivalence of one- and two-phase models for heat transfer processes in packed beds: one dimensional theory. *Chemical Engineering Science*, *29*(2), 485–491.

Zheng, D., & Hoo, K. A. (2002). Low-order model identification for implementable control solutions of distributed parameter systems. *Computers and Chemical Engineering*, *26*(7–8), 1049–1076.

Zheng, D., & Hoo, K. A. (2004). System identification and model-based control for distributed parameter systems. *Computers and Chemical Engineering*, *28*(8), 1361–1375.

Proceedings of the 17th World Congress
The International Federation of Automatic Control
Seoul, Korea, July 6-11, 2008

Model Predictive Control of Free Surfactant Concentration in Emulsion Polymerization

Bruno da Silva, Pascal Dufour [1]
Nida Sheibat-Othman and Sami Othman

Université de Lyon, Lyon, F-69003, France ; Université Lyon 1 ; CNRS UMR 5007 LAGEP (Laboratory of Process Control and Chemical Engineering), 43 bd du 11 novembre, 69100 Villeurbanne, France

Abstract: In emulsion polymerization processes, the surfactant concentration plays an important role in the latex stability, reaction kinetics and particle size distribution (PSD). Controlling the free surfactant concentration in the aqueous phase ensures the stability of the latex and the control of the micellar nucleation rate. The PSD is determined by particle nucleation, growth and stability which are highly nonlinear behaviors. The PSD affects the polymer rheology, adhesion, optical properties and mechanical strength. This work deals with the model predictive control (MPC) of free surfactant concentration using the surfactant feed rate as a control variable. The used strategy is a global method that aims to reduce the on-line calculation time due to the partial differential equations (PDE) model based optimization task resolution. In order to decrease the computational burden, the nonlinear PDE system is solved off-line. Then, a linearized PDE model around the previous off-line behavior is used to find the optimal variations for the on-line predictive control.

Keywords: Control of distributed systems; Model predictive and optimization-based control; Process control applications.

1. INTRODUCTION

The main objective of this paper is to apply MPC to emulsion polymerization processes modeled by nonlinear partial distributed equations. Semino and Ray (1995) have studied the formal controlability of emulsion polymerization described by population balance equations (PBE) and employed the feed concentrations of surfactant, initiator, inhibitor to control the PSD.In the literature, few results have been published for the close loop control of PSD where its dynamic is governed by population balance equations. Many works, Crowley et al. (2000), Immanuel and Doyle III (2002) and Zeaiter et al. (2002) used an open loop model optimization to attain a final target PSD . The calculation of optimal control trajectories is done off line. Flores-Cerillo and MacGregor (2002) addressed the control of the PSD, using available on-line measurement (temperature) and off-line measurement (PSD) to predict the final PSD and, if necessary, to compute mid-course corrections. Doyle III et al. (2003) proposed a hybrid model based approach for batch-to-batch control of PSD. On-line measurement of the full PSD was assumed available which is still a challenging issue. Wang and Doyle III (2004) proposed a reachability analysis of systems described by PBE and pointed out the importance of proper initial reaction conditions, and in the case of midcourse correction the importance of early PSD measurements, with proper early corrective action. Zeaiter et al. (2006) implemented a MPC strategy for a single input single output (SISO) case for PSD control with monomer flow rate manipulation and investigated a multiple input multiple output (MIMO) control of PSD and molecular-weight distribution (MWD) simultaneously where the monomer flow rate and reactor temperature are manipulated variables.

In practice, sensors used to measure the PSD usually require sampling, dilution and analysis. Due to this difficult and time consuming analysis, usualy soft sensors or open loop model based observers were employed. Santos Jr. et al. (2007) used the conductivity measurements and ion-selective electrodes to monitor the free surfactant molecules during anionic (sodium dodecyl sulfate) stabilized emulsion polymerization. This information would provide information about the particle stabilization and the rate of nucleation which gives an alternative measurement to control the PSD.

In this study, we consider model predictive control of the free surfactant concentration in the aqueous phase, using the surfactant flow rate as a constrained manipulated variable. Controlling the free surfactant in the aqueous medium may ensure the stability of latex, and the dispersity of the distribution by controlling the micellar nucleation. In the first part of this paper, the dynamic model of emulsion polymerization is adapted. Secondly, the control strategy applied in Dufour et al. (2003) for PDE systems

[1] Corresponding author: Pascal Dufour, Fax: 33-4.72.43.16.99, E-mail: dufour@lagep.univ-lyon1.fr

to reduce the on-line resolution time is employed. Finally, simulation results are discussed.

2. STYRENE EMULSION POLYMERIZATION MODEL

In emulsion polymerization, the PSD can be described by two types of models. The first model is the pseudo-bulk model that is available for large particles in which more than one free radical can co-exist in a same particle for a significant period, Immanuel and Doyle III (2002). The second model is the 0-1 model. It was used by Coen et al. (1998) to model coagulation and secondary nucleation. This model is adapted only for systems with the number of radicals per particle equal to 0 or 1. Therefore, this model is generally available for small particles. It distinguishes particles who have a polymeric radical (n_{1p}), particles who have no radicals (n_0) and particles who have a monomeric radical (n_{1m}).

2.1 0-1 model

Models describing the process kinetics and particle evolution for the 0-1 system is given in detail in Crowley et al. (2000).

$$\begin{cases} \dfrac{\partial n_0(r,t)}{\partial t} = \rho(r)(n_{1p}(r) + n_{1m}(r) - n_0(r)) \\ \qquad\qquad +k_0(r)n_{1m}(r) \\ \dfrac{\partial n_{1p}(r,t)}{\partial t} = -(\rho(r) + k_{tr}[M]_p)n_{1p}(r) + \rho_r(r)n_0(r) \\ \qquad\qquad +k_{pe}[M]_p n_{1m}(r) - \dfrac{\partial\left[G(r)n_{1p}(r)\right]}{\partial r} \\ \dfrac{\partial n_{1m}(r,t)}{\partial t} = \rho_m(r)n_0(r) + k_{tr}[M]_p n_{1p}(r) \\ \qquad\qquad -n_{1m}(r)(\rho(r) + k_{pe}[M]_p + k_0(r)) \end{cases} \tag{1}$$

where $[M]_P$ is the monomer concentration in particles, k_{tr} is the coefficient of transfer to monomer in the polymer particle, k_{pe} is the propagation coefficient of monomeric radicals in particles, $\rho(r,t) = \rho_r(r,t) + \rho_m(r,t)$ represents the overall rate of radical entry into particles with:

$$\begin{cases} \rho_r(r) = \displaystyle\sum_{i=z}^{j_{crit-1}} k_{e,i}(r)[IM_i] \\ \rho_m(r) = k_{eE}(r)[E] \end{cases} \tag{2}$$

$[IM_i]$ is the concentration of oligomeric radicals of degree i in the aqueous phase, $[E]$ is the concentration of monomeric radicals that can desorb out of particles, z is the critical chain length at which polymer particles can enter into polymer radicals or micelles (micellar nucleation), j_{crit} is the chain length at which the radicals become insoluble in water and precipitate forming new particles (homogeneous nucleation).

Rate coefficients of monomer radicals entry into particles k_{eE}, oligomer radicals entry into particles $k_{e,i}$, radicals entry into micelles $k_{em,i}$ and radicals desorption from particles k_0 are governed by the diffusion coefficient D_w and depend on the particle radius r.

The total number of particles of size between r and $r + dr$ is given by:

$$n(r,t) = n_0(r,t) + n_{1p}(r,t) + n_{1m}(r,t) \tag{3}$$

The average number of radicals in particles of size r at time t, $\bar{n}(r,t)$ is given by:

$$\bar{n}(r,t) = \frac{n_{1p}(r,t) + n_{1m}(r,t)}{n(r,t)} \tag{4}$$

Particle growth rate is given by:

$$G(r) = \frac{k_p[M]_P MW_m}{4\pi r^2 d_p N_A} \tag{5}$$

with k_p the monomer propagation rate coefficient into particles, MW_m the molecular weight of monomer, d_p the density of polymer and N_A Avogadro's number.

Both homogeneous and micellar nucleations are considered. The total nucleation rate ($\Re_{nuc} = \Re_{nuc}^{hom} + \Re_{nuc}^{mic}$) acts as a boundary condition of (1):

$$n_{1p}(r_{nuc},t) = \frac{\Re_{nuc}(t)}{G(r_{nuc})} \tag{6}$$

where $G(r_{nuc})$ is the growth rate of particles of size r_{nuc} and

$$\begin{cases} \Re_{nuc}^{hom} = k_{p,(j_{crit}-1)}^{aq}[M]_{aq}[IM_{j_{crit}-1}]v^{aq} \\ \Re_{nuc}^{mic} = \displaystyle\sum_{i=z}^{j_{crit}-1} k_{em,i}[Mic][IM_i]v^{aq} \end{cases} \tag{7}$$

with $[M]_{aq}$ the monomer concentration in the aqueous phase, $[Mic]$ the concentration of micelles, $k_{p,i}^{aq}$ the coefficient of propagation of monomer with radical on length i, r_{nuc} the nucleation radius and v_{aq} the aqueous phase volume.

2.2 Monomer material balance

The residual amount of monomer is given by:

$$\frac{dN_m}{dt} = Q_m - k_p[M]_P \int_{r_{nuc}}^{\infty} \bar{n}(r,t)n(r,t)dr \tag{8}$$

where N_m is the number of moles of residual monomer and Q_m is the monomer flow rate.

2.3 Surfactant material balances

The number of moles of surfactant introduced into the reactor is given by:

$$\frac{dN_S}{dt} = Q_S \tag{9}$$

where Q_S is the flow rate of surfactant. The concentration of free surfactant in the aqueous phase $[S_{aq}]$ can be calculated from the following equation:

$$[S^{aq}]v^{aq} = N_S - N_S^P - N_S^d \tag{10}$$

where N_S^P and N_S^d are the number of moles of surfactant adsorbed on the surface of particles and droplets respectively:

$$N_S^d = \frac{3V^d}{a_{sd}r_d N_A} \tag{11}$$

V^d is the droplets volume, a_{sd} is the surface area of droplets covered by a single surfactant molecule and rd is the radius of the monomer droplets.

$$N_S^P = \frac{S_{par}}{N_A A_S} \tag{12}$$

S_{par} is the total particle surface:

$$S_{par} = 4\pi N_A \int_{r_{nuc}}^{\infty} n(r) r^2 dr \tag{13}$$

A_s is the minimum area occupied by a single surfactant molecule:

$$A_s = a_{sp}(1 + \frac{1}{[S^{aq}]b_s}) \tag{14}$$

where a_{sp} is the surface area of particles covered by a single surfactant molecule and b_s is the Langmuir adsorption isotherm parameter.

The concentration of micelles is given by:

$$[Mic] = max(0, \frac{[S^{aq}] - CMC}{n_{agg}}) \tag{15}$$

where CMC is the critical micellar concentration and n_{agg} is the aggregation number for the surfactant.

2.4 Aqueous phase reactions

The polymerization process starts by the initiator decomposition (I) in the aqueous phase producing primary radicals ($I^\bullet$) that react with monomer molecules to generate oligomeric radicals (IM_i).

The material balances of the species in the aqueous phase are given by:

$$\begin{aligned}
&\frac{1}{v^{aq}}\frac{d([I]v^{aq})}{dt} = \frac{Q_I}{v^{aq}} - k_d[I] \\
&\frac{1}{v^{aq}}\frac{(d[I^\bullet]v^{aq})}{dt} = 2k_d[I] - \left(k_{pI}^{aq}[M]_{aq} + k_t^{aq}[T]\right)[I^\bullet] \\
&\frac{1}{v^{aq}}\frac{d([IM_1]v^{aq})}{dt} = k_{pI}^{aq}[M]_{aq}[I^\bullet] \\
&- \left(k_{p,1}^{aq}[M]_{aq} + k_t^{aq}[T] + k_{tr}^{aq}[M]_{aq}\right)[IM_1] \\
&\frac{1}{v^{aq}}\frac{d([IM_i]v^{aq})}{dt} = k_{p,i-1}^{aq}[M]_{aq}[IM_{i-1}] \\
&- \left(k_{p,i}^{aq}[M]_{aq} + k_t^{aq}[T] + k_{tr}^{aq}[M]_{aq}\right)[IM_i], \quad i = 2, z-1 \\
&\frac{1}{v^{aq}}\frac{d([IM_i]v^{aq})}{dt} = k_{p,i-1}^{aq}[M]_{aq}[IM_{i-1}] \\
&- \left(k_{p,i}^{aq}[M]_{aq} + k_t^{aq}[T] + k_{tr}^{aq}[M]_{aq} + k_{em,i}[Mic]\right)[IM_i] \\
&- \frac{1}{v^{aq}}\int_{r_{nuc}}^{\infty} k_{e,i} n(r) dr [IM_i], \quad i = z, j_{crit} - 1 \\
&\frac{1}{v^{aq}}\frac{d([E]v^{aq})}{dt} = \frac{1}{v^{aq}}\int_{r_{nuc}}^{\infty} k_0(r) n_{1m}(r) dr + k_{tr}^{aq}[M]_{aq}[T] \\
&- \frac{1}{v^{aq}}\int_{r_{nuc}}^{\infty} k_{eE}(r)[E]n(r)dr - k_t^{aq}[E][T]
\end{aligned} \tag{16}$$

where k_d is the coefficient of initiator decomposition, k_t^{aq} is the coefficient of termination in the aqueous phase, k_{tr}^{aq} is the coefficient of transfer to monomer in the aqueous phase, Q_I is the initiator flow rate, $[I]$ is the initiator concentration, $[T]$ is the total concentration of radicals in the aqueous phase: $[T] = \sum_{i=1}^{j_{crit}-1}[IM_i] + [E] + [I^\bullet]$.

2.5 Bulk-like model

Edouard et al. (2005) have written the 0-1 model under a new form, the bulk-like model. The state represents the total number of particles of size r ($n(r)$) for the 0-1 system and does not distinguish particles as a function of the number of radicals they contain ($n_{1p}(r)$, $n_{1m}(r)$, $n_0(r)$). This allows the process output to become a part of the state of the model if a sensor is used to measure the particle size from time to time.

The model is developed using system (1). With the following change of variables ($N(r,t) = n_{1p}(r,t) + n_{1m}(r,t)$) we obtain:

$$\bar{n}(r,t) = \frac{N(r,t)}{n(r,t)} \tag{17}$$

Taking the sum of the three equations in the 0-1 model (1) and assuming that the growth of the particles n_{1m} is not negligible gives a balance on the total number of particles in the reactor:

$$\frac{\partial n(r,t)}{\partial t} = -\frac{\partial\left[G(r)\bar{n}(r,t)n(r,t)\right]}{\partial r} \tag{18}$$

and the following equation can be obtained for $\bar{n}(r,t)$ by deriving equation(17) with respect to time:

$$\frac{\partial \bar{n}(r,t)}{\partial t} = \frac{n(r,t)\frac{\partial N(r,t)}{\partial t} - N(r,t)\frac{\partial n(r,t)}{\partial t}}{n^2(r,t)} \tag{19}$$

The quasi-steady state assumption for $n_{1m}(r,t)$ Crowley et al. (2000) gives:

$$\begin{aligned}
n_{1m}(r,t) = &\frac{\rho_m(1-\bar{n})n}{\rho + [M]_P(k_{pe} + k_{tr}) + k_0} \\
&+ \frac{k_{tr}[M]_P\bar{n}n}{\rho + [M]_P(k_{pe} + k_{tr}) + k_0}
\end{aligned} \tag{20}$$

We obtain the following model (bulk-like model) representing the PSD of a 0-1 system:

$$\begin{cases}
\dfrac{\partial n(r,t)}{\partial t} = -\dfrac{\partial\left[G(r)\bar{n}(r)n(r)\right]}{\partial r} \\
\dfrac{\partial \bar{n}(r,t)}{\partial t} = \rho(r)(1 - 2\bar{n}(r)) - k_0(r)\dfrac{n_{1m}(r)}{n(r)^2} \\
\qquad + \dfrac{\partial\left[G(r)\bar{n}(r)n(r)\right]}{\partial r}\left(\dfrac{\bar{n}(r) - 1}{n(r)}\right)
\end{cases} \tag{21}$$

with the boundary conditions:

$$\begin{cases}
n(r_{nuc}, t) = \dfrac{\Re_{nuc}(t)}{G(r_{nuc})} \\
\bar{n}(r_{nuc}, t) = 1
\end{cases} \tag{22}$$

3. MPC AND EMULSION POLYMERIZATION

MPC is employed in a wide variety of real-time control applications, including chemical engineering, Qin and Badgwell (2003). At each sample time, with the update of new process measurements, an open-loop optimization over a finite prediction horizon aims to find the sequence of manipulated variables, which guarantees optimum process operation with robustness to operating conditions and model uncertainties. But few MPC studies are devoted to processes involving complexity of chemical properties and PDE models which describe such systems. In this work, the MPC strategy proposed by Dufour et al. (2003) is used. The control structure is an adaptation of MPC with internal model control (IMC) structure where the nonlinear PDE system (solved off-line) and a linearized PDE system (solved on-line) are both used to decrease the computational burden. The control strategy is concerned with on-line resolution that aims to correct off-line structure results. A similar control structure is applied by Zeaiter et al. (2006), considering step-response coefficients updated at every sequence and a disturbance term. The disturbance term correspond to the disturbance due to plant/model mismatch and the disturbance due to nonlinearities (d^{nl}). The term d^{nl} is determined at every sampling time by minimizing the output prediction error between the linear and non-linear models.

3.1 MPC strategy

The control problem is a general optimization problem over a receding horizon N_p where J is the cost function according to the desired objective, trajectory tracking in this study. This performance index can be written:

$$J(p) = \sum_{j=k+1}^{k+N_p} g(y_{ref}(j), y_m(j), u(j-1), e(k)) \tag{23}$$

where k (resp. j) is the actual (resp. future) discrete time index, y_{ref} describes the specified constrained behavior for the process output y_p, y_m is the continuous model output and the error $e(j)$ is assumed constant (updated at each k) in the future: $e(j) = e(k) = y_p(k) - y_m(k)$.

In order to take into account constraints on the manipulated variables, the transformation method for variables allows translating explicit magnitude and velocity constraints on the optimization argument u as a new unconstrained argument p, Fletcher (1987).

$$\begin{cases} u(j) = f(p(j)) = f_{moy} + f_{amp} \tanh\left(\dfrac{p(j) - f_{moy}}{f_{amp}}\right) \\ f_{moy} = \dfrac{f_{max} - f_{min}}{2} \\ f_{amp} = \dfrac{f_{max} + f_{min}}{2} \\ f_{min} = \max(u_{min}, u(j-1) + \Delta u_{min}) \\ f_{max} = \min(u_{max}, u(j-1) + \Delta u_{max}) \end{cases} \tag{24}$$

Consequently, the penalized problem can be solved by any unconstrained optimization algorithm: the well-known and robust Levenberg-Marquardt's algorithm is used.

The nonlinear PDE model is discretized using the finite differences giving a finite nonlinear model (S_0). The nonlinear PDE system is linearized giving a time-varying linearized model (S_{TVL}). To decrease the on-line computational time, the nonlinear algebraic differential equations are solved off-line (S_0) and the (S_{TVL}) is solved on-line. These models are used on the following MPC linearized IMC-MPC structure:

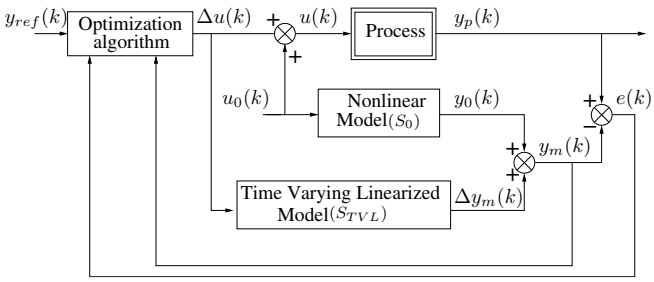

Fig. 1. General linearized IMC-MPC structure

3.2 Model building for PSD prediction

The considered model for the (S_0) trajectories is given in section 2.5, but only intervals I-II are considered, droplets of monomer are present during all the run. Consequently, $[M]_p$ and $[M]_{aq}$ are constant. Also, according to the model complexity, it was interesting to consider a simplified model for the on-line computation. Terms in the $\bar{n}(r,t)$ expression (21) which do not influence the overall dynamic ($S_0 + S_{TVL}$) are neglected which leads to:

$$\begin{cases} \dfrac{\partial n(r,t)}{\partial t} = -\dfrac{\partial[G(r)\bar{n}(r)n(r)]}{\partial r} \\ \dfrac{\partial \bar{n}(r,t)}{\partial t} = \dfrac{\partial[G(r)\bar{n}(r)n(r)]}{\partial r}\left(\dfrac{\bar{n}(r)-1}{n(r)}\right) \end{cases} \tag{25}$$

3.3 Control objective

In terms of final quality, many latex products have enhanced properties due to bimodal PSD. Free surfactant concentration is the essential driving force for particle nucleation (micellar nucleation). Consequently, controlling the free surfactant concentration causes micellar nucleation and influence the final PSD. In micellar nucleation, a particle is formed by the entry of a radical into a micelle, which can occur only above the CMC of the surfactant. Moreover, controlling free surfactant concentration can ensure the latex stability. For this reason, we considered surfactant feed rate as a manipulated variable and free surfactant concentration in the aqueous phase as controlled variable. The SISO control problem considered here is the tracking of a reference trajectory $y_{ref}(t)$ for the process free surfactant concentration, subject to magnitude input constraints on the surfactant flow rate.

$$J(p) = \sum_{j=k+1}^{k+N_p} (y_{ref}(j) - y_m(j) - e(k))^2 \tag{26}$$

where $y_m(j) = y_0(j) + \Delta y_m(j)$, y_0 is the nonlinear model trajectory output solved off-line and Δy_m is the time-varying linearized model output computed on-line.

Using the link between free surfactant concentration and PSD, the choice of the reference trajectory depends on

the final PSD objective. To create a new population, the output free surfactant concentration must be above the CMC. Whereas, in order to ensure the stability of the latex without creating new particles, the ouput must be below the CMC but close to the CMC in order to ensure saturation of particles with surfactant and to allow a rapid control of the nucleation rate at any moment.

4. SIMULATION RESULTS

The physical and kinetic parameters for styrene at 50^oC are given by Edouard et al. (2005). The MPC strategy was run in the MATLAB environment using the MPC@CB [2] software. The software allows realizing the MPC under constraints of a continuous process. The originality of this software is first the ease of its use for any continuous SISO or MIMO process, through the user files, synchronized by few standard files, see Abid et al. (2007) for a painting curing process and Daraoui et al. (2007) for a lyophilisation process. Test runs were performed for an ab initio emulsion homopolymerization of styrene with a 60 seconds sampling time. Results with the same initial conditions ($N_i(0) = 0.001$ mol, $N_s(0) = 0.004$ mol, $N_m(0) = 3.59$ mol) and different objective trajectories are shown in figures 2 - 4. These three cases are focused on the design of the free surfactant concentration trajectory to obtain a final bimodal PSD. Employing the same initial conditions and the same trajectory references up to the 100th minute implies that the last peak of the PSD has the same size for the three cases at the end of the simulation.

It can be seen that the output value is very close to the reference trajectory. Moreover, the free surfactant concentration profile and the final PSD are closely dependent. Tracking the free surfactant concentration allows an indirect control of the PSD.

Figures 2 and figures 3 show that the choice of the reference trajectory of the free surfactant concentration directly influences the final PSD. The two runs are the same until the 280th minute. In the first case (figures 2), the reference implies only one micellar nucleation at the beginning of the simulation and consequently a monomodal PSD. Whereas in the second case (figures 3), the choice of the output profile leads to a bimodal PSD, with a secondary nucleation. It should be outlined however that the choice of the free surfactant concentration trajectory to attain a bimodal distribution is not really evident. Figure 4 shows that the time between the two nucleations is very critical. When the second nucleation was started at 115 minutes, instead of having a bimodal distribution, the attained PSD was broadened. The desired PSD should be determined the application.

5. CONCLUSION

Controlling the free surfactant concentration is efficient for PSD on-line control. The design of the output trajectory allows an indirect control of the PSD. The proposed MPC strategy allows decreasing the computional burden during on-line control and offers good perspectives for PSD control. The control of the whole PSD (nucleation and growth), measuring both the PSD and the surfactant in the aqueous phase which leads to a MIMO control problem, is currently under study. Finally, this work is based on simulations and the experimental validation of this approach is under study.

[2] University Claude Bernard Lyon 1 - EZUS. In order to use MPC@CB, please contact the author: dufour@lagep.univ-lyon1.fr

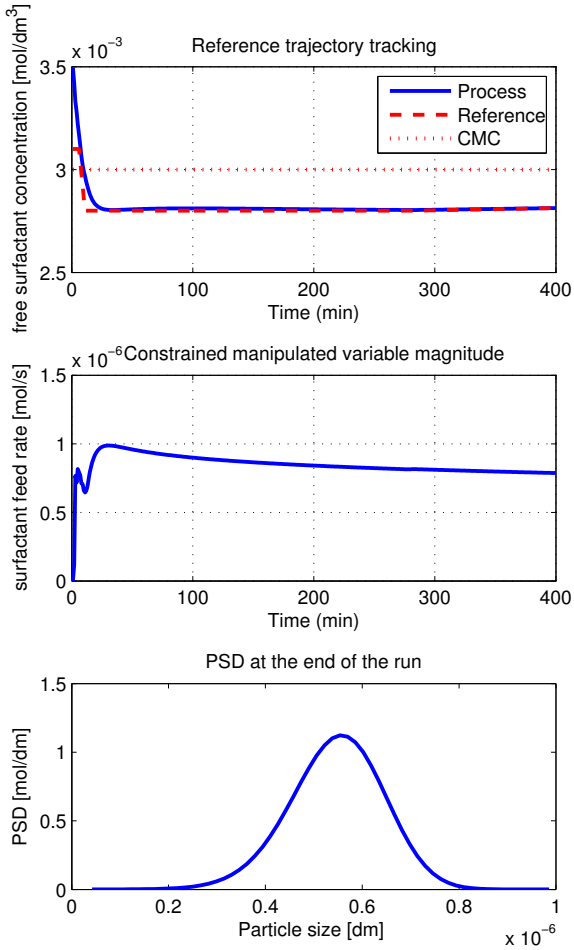

Fig. 2. Optimization by MPC of the dynamic of the output free surfactant concentration (run 1)

REFERENCES

K. Abid, P. Dufour, I. Bombard, and P. Laurent. Model predictive control of a powder coating curing process: an application of the **MPC@CB** software. *IEEE Chinese Control Conference, Zhangjiajie, China*, 2:630–634, 2007.

E.M. Coen, R.G. Gilbert, B. R. Morrison, H. Leube, and S. Peach. Modeling particle size distribution and secondary particle formation in emulsion polymerization. *Polymer*, 39(26):7099, 1998.

T.J. Crowley, E.S. Meadows, E. Kostoulas, and F.J. Doyle III. Control of particle size distribution described by a population balance of semibatch emulsion polymerization. *Journal of Process Control*, 10, 2000.

N. Daraoui, P. Dufour, and H. Hammouri. Model predictive control of the primary drying stage of a freeze drying of solutions in vials: An application of the **MPC@CB**

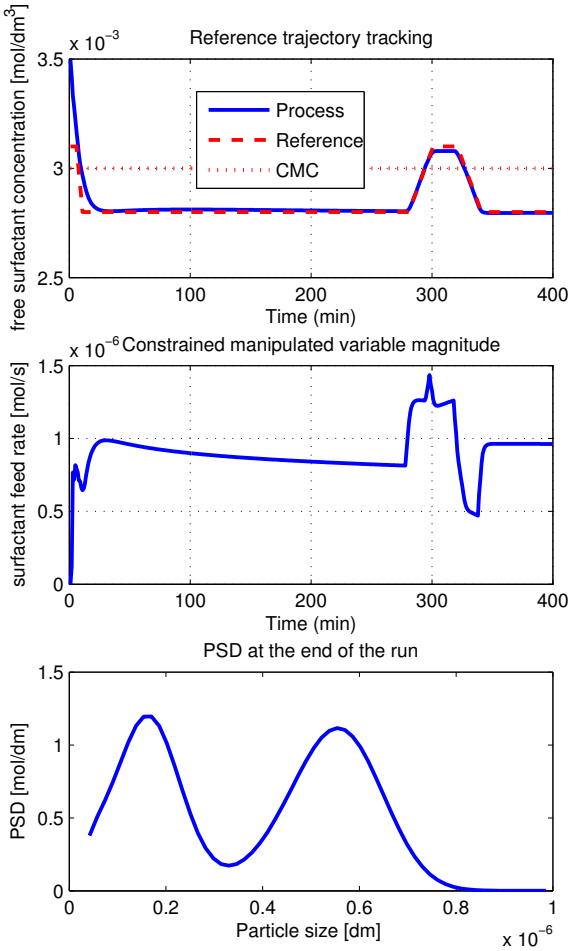

Fig. 3. Optimization by MPC of the dynamic of the output free surfactant concentration (run 2)

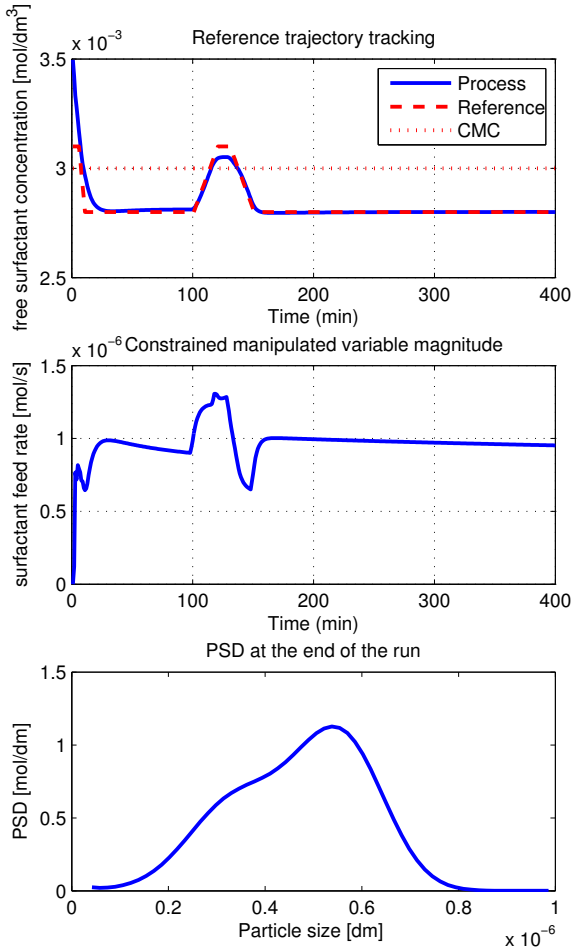

Fig. 4. Optimization by MPC of the dynamic of the output free surfactant concentration (run 3)

software (part1). *6th Asian Drying Conference, Hong Kong, China*, 2:883–888, 2007.

F. J. Doyle III, C.A. Harrison, and T.J. Crowley. Hybrid model-based approach to batch-to-batch control of particle size distribution in emulsion polymerization. *Computer and Chemical Engineering*, 27:1153–1163, 2003.

P. Dufour, Y Touré, D. Blanc, and P. Laurent. On nonlinear distributed parameter model predictive control strategy : on-line calculation time reduction and application to an experimental drying process. *Computer and Chemical Engineering*, 27:1533–1542, 2003.

D. Edouard, N. Sheibat-Othman, and H. Hammouri. Observer design for particle size distribution in emulsion polymerisation. *AIChE Journal*, 51(12), 2005.

R. Fletcher. *Pratical Methods of Optimization*. John Wiley and Sons, 1987.

J. Flores-Cerillo and J. F. MacGregor. Control of particle size distributions in emulsion semibatch polymerization using mid-course correction policies. *Industrial and Engineering Chemistry Research*, 41:1805–1814, 2002.

C. D. Immanuel and F. J. Doyle III. Open-loop control of particle size distribution in semi-batch emulsion copolymerization using a genetic algorithm. *Chemical Engineering Science*, 57:4415–4427, 2002.

S.J. Qin and T.A. Badgwell. A survey of industrial model predictive control technology. *Control Engineering Practice*, pages 733–764, 2003.

G.P. Santos Jr., C. Martins, M. Fortuny, A.F. Santos, M. Turmine, C. Graillat, and T.F.L. McKenna. In-line and in situ monitoring of ionic surfactant dynamics in latex reactors using conductivity measurements and ion-selective electrodes. *Ind. Eng. Chem. Res.*, 46:1465–1474, 2007.

D. Semino and W. H. Ray. Control of systems described by population balance equations-ii. emulsion polymerization with constrained control action. *Chemical Engineering Science*, 50:1825–1839, 1995.

Y. Wang and F. J. Doyle III. Reachibility of particle size distribution in semibatch emulsion polymerization. *AIChE Journal*, 50:1153–1163, 2004.

J. Zeaiter, J.A. Romagnoli, and V.G. Gomes. Operation of semi-batch emulsion polymerization reactors : Modelling, validation and effect of operating conditions. *Chemical Engineering Science*, 57:2955–2969, 2002.

J. Zeaiter, J.A. Romagnoli, and V.G. Gomes. Online control of molar mass and particle-size distributions in emulsion polymerization. *AIChE*, 52:1770–1779, 2006.

Chemical Engineering Science 65 (2010) 962–975

Contents lists available at ScienceDirect

Chemical Engineering Science

journal homepage: www.elsevier.com/locate/ces

Experimental predictive control of the infrared cure of a powder coating: A non-linear distributed parameter model based approach

I. Bombard [a,b,1], B. Da Silva [a,b], P. Dufour [a,b,*], P. Laurent [a,b]

[a] Université de Lyon, F-69622 Lyon, France
[b] Université Lyon 1, Villeurbanne, CNRS, UMR 5007, LAGEP, 43 bd du 11 novembre, 69100 Villeurbanne, France

ARTICLE INFO

Article history:
Received 17 October 2008
Received in revised form
11 May 2009
Accepted 18 September 2009
Available online 13 October 2009

Keywords:
Process control
Powder coating
Optimization
Radiative curing
Model predictive control
Heat transfer

ABSTRACT

This paper deals with the experimental model based predictive control of the infrared cure cycle of a powder coating. It is based on a dynamic infinite dimensional model of the cure in one spatial domain, which aims to represent the evolution of the temperature and the degree of cure during the cure under infrared flow. The sensitivity of this model with respect to the main radiative property is experimentally highlighted under open loop conditions. This partial differential equation model is then approximated in finite dimension in order to be used by the predictive controller. Since the sampling time is small (one second), a special model predictive control formulation is used here, which aims to decrease the on-line computational time required by the control algorithm. Experimental evaluation of this controller that is based on the MPC@CB software is then presented. For black and white paintings, the robustness of this control algorithm is shown during an experimental temperature constrained trajectory tracking, even under a strong modeling uncertainty. The conclusion of this study is that this controller may be used for advanced control of powder coating cure.

© 2009 Elsevier Ltd. All rights reserved.

1. Introduction to powder coatings

Powder coatings used in coating techniques are finely ground plastic particles consisting of resin, cross linker (in thermoset powders), pigments and extenders, and various flow additives and fillers to achieve specific properties. They are principally based on epoxy, polyester, hybrid (combinations of acid polyester and epoxy) and polyurethane resins. Generally they are either thermoset or thermoplastic coatings, but quite recently ultra-violet curable coatings (where the reaction is initiated by ultra-violet (UV) radiation) and low-temperature coatings designed for heat sensitive substrates have appeared on the coatings market. During the cure, most generally realized under infrared emitters, thermoset powder coatings are present with a broad variety of morphologies (Lee et al., 1999; Véchot et al., 2006):

- at the powder state, they are applied on the steel panel (the substrate) by electrostatic means; the packing of the grains as well as the thickness of the powder layer can be variable and each powder can present different particle size distributions;
- the curing begins with the melting of the powder coating, which is (at this state) like a viscous liquid; and
- after a viscosity decay due to the temperature increase during the cure, the polymerization reaction begins and the surface structure builds up until the end of the reaction.

The advantages associated with powder coatings include (Weiss, 1997): durable finishes, high application efficiency, easy clean-up and recycling. Powder coatings also represent a technological solution that is environmentally friendly since these paintings are almost 100% solids (i.e., near zero VOC (volatile organic compound) content). Due to VOC regulations, powder coatings (as waterborne coatings) could therefore replace organic solvents in coating techniques. Although they can be a mean to decrease VOC pollution, they have yet not found the success they deserve and their application domains remain unchanged: architecture (outdoor and indoor), furniture, domestic appliances, heaters, cars accessories (Véchot et al., 2006). The main issue is dealing with the cure cycle of the powder coatings. Indeed, during the cure of powder coatings (also known as the curing or curing cycle), the quality of the cured product is strongly influenced by the temperature path together with the maximum temperature to which the powder coating is heated. Deviation from specified optimum cure conditions can therefore lead to coatings which have surface defects and/or coatings which do not adhere to the substrate. The curing cycle optimization generally depends

* Corresponding author at: Université de Lyon, F-69622, Lyon, France.
Tel.: +33 4 72 43 18 78; fax: +33 4 72 43 16 99.
E-mail address: dufour@lagep.univ-lyon1.fr (P. Dufour).
[1] Work supported by the Philips Eclairage, EDF, ADEME and Dupont Powder Coatings France SAS.

0009-2509/$ - see front matter © 2009 Elsevier Ltd. All rights reserved.
doi:10.1016/j.ces.2009.09.050

primarily on the know how of the operator and on the use of temperature profiling software (Wood, 2007).

The Ph.D. Thesis of Bombard was a global research project on the infrared (IR) curing process of powder coatings (Bombard, 2007) aimed at bringing some technical knowledge about the experimental cure cycle of powder coating to potential users. It tackled both modeling and control aspects. The first complete model of the coating radiative properties and of the spectral emissivities of the infrared emitters may be found in Véchot et al. (2006) and Bombard et al. (2008). However, in this model used here, the reflectance and the emitter emissivity are not measured on-line during the curing, although they vary with the type of infrared flow emitted: any model based controller used for this process has therefore to be robust with respect to this modeling uncertainty. This model has previously been used in simulation in a closed loop control approach (Abid et al., 2007) to tune on-line the infrared flow applied during the cure cycle, such that one of the curing characteristics (the measured temperature at the bottom surface) tracks as best as possible a specified time dependant trajectory. These simulations have shown that a model predictive control (MPC) based on this model gives better results than a proportional integral derivative (PID) controller when robustness with respect to model parameter uncertainty is needed. In this paper, the next step is tackled: evaluation of the robustness of this model based controller with respect to real uncertainties due to experimental conditions.

This paper is structured as follows: first, the modeling principles of the powder coating cure under IR flow are detailed. It is a non-linear partial differential equation (PDE) model in one spatial dimension. The influence of the main model parameters during the cure is underlined. Then, the model based predictive control approach is reviewed, where any constrained control objective may be specified in the control software (trajectory tracking, processing time minimization). Experimental results then help to show how the proposed special MPC algorithm may be useful and robust to experimentally control this kind of process, even if uncertainties dealing with the material used exist.

2. Modeling of powder coatings

Model based control techniques would be very helpful to get a better control of the cure (and hence get a final product of better quality) and to promote the use of powder coatings in more application domains. Meanwhile, very few models of the curing process have yet been developed in the literature:

- The first study (Degnan, 1982) dealt with the modeling of electron beam cured coatings based on an ordinary differential equation (ODE) curing model coupled with the temperature profile obtained in 2-D by non dynamic model.
- Much later, in Deans and Kögl (2000), a Monte Carlo model of the heat transfer process was used for the curing of powder coatings using gaseous infrared heaters, but without modeling the degree of cure.
- In Chattopadhyay et al. (2005), an ODE model of degree of cure of moisture-cured polyurethane/polyurea coatings under a software based cure cycle was presented, and combined with the measurement of a mechanical property. There was no heat transfer modeling.
- Vergnaud's team was the first to use PDE models: In Perou and Vergnaud (1997) a coupled PDE model of heat and mass transfers and cure was built to study the resistance of coil coatings to liquids.
- In Salagnac et al. (2004), a PDE model of heat and cure of composite material parts in a small diameter autoclave was developed and validated experimentally.
- In Véchot et al. (2006) and Bombard et al. (2008) developed the basis of the model used in this paper: it was a coupled heat transfer and cure PDE model of powder coating during infrared curing.

2.1. Parameters influencing the radiative properties

Numerous reports in the literature show how the chemical composition and physical state of materials affect the intensity and the shape of the reflectance spectra, which is an important parameter in the IR curing process:

- The cure cycle has a strong impact over the radiative properties (Carr et al., 1999); the effect of the cure is though variable, depending on the chemical composition of the powder coating. When comparing the spectral absorptivities of uncured and cured powder coatings; Carr et al. (1999) found the largest absorptivity differences with the unpigmented coatings; for the white coatings the difference was smaller whereas the difference was insignificant for the black ones. Therefore, the knowledge of the radiative properties enables to determine their dependence with the physical and chemical state of the material and, as a consequence, is useful in numerous applications involving radiative heat transfer (Carr et al., 1999; Deans and Kögl, 2000), such as the radiative curing of powder coatings. This knowledge is yet insufficient, as the absorption of infrared energy by a material depends not only on the spectral absorption characteristics of the material being heated but also on the spectral output of the infrared source (Bombard et al., 2005; Véchot et al., 2006). This will be underlined in our study.
- The spectral output of the infrared source indeed influences the (heated) material radiative properties (Papini, 1996, 1997; Tongsuo et al., 2002; Ventura and Papini, 1999). This phenomenon is particularly more difficult to study if the infrared flow emitted is time dependant, for example if it is applied as a closed loop control action like in this work.
- Radiative properties are also influenced by the physical state of the painting: the particle size, the particle shape, the granular packing and the thickness (for powders). For films, they are function of the surface roughness and the thickness. Moreover, pigments greatly affect the infrared absorption by scattering and/or absorbing IR radiation. For example carbon black absorbs IR energy almost completely throughout the IR spectrum.
- The substrate nature and its surface state can also influence the reflectance values; the effect can be more or less important, depending on the coating thickness and the pigment nature (Tongsuo et al., 2002).

Although the efficiency of IR curing depends mostly on both the spectral emissions of the infrared source and on the coating radiative characteristics during the cure, we have not found any reference dealing with the measurement of the spectral reflectance during the cure cycle: Spectral reflectances are measured either before the cure (at the powder state) or after the cure (the cure state) (Bombard et al., 2008; Carr et al., 1999; Deans and Kögl, 2000). Reflectance values vary with the chemical composition, the pigment nature, and are influenced by the powder coatings cure. Cure cycle depends both on the coating radiative properties of the powder coating and on the kind of IR emitter used. A better knowledge of the spectral emissivities of infrared heaters and of

the parameters influencing the radiative absorption of the powder coating is therefore first needed to optimize the curing process through a model based approach.

2.2. Experimental setup

2.2.1. Material

The powder coatings selected for this work are widely used commercial thermosetting powders in the metal coating industry and are supplied by DuPont Powder Coatings France SAS. The paint used here (named paint A) is a polyester-based system containing triglycidylisocyanurate (TGIC). It is supplied in black (B) and white (W); their characteristics and ideal curing conditions obtained from technical recommendations of Dupont powder coating France are summarized in Table 1. The substrates used for this study are steel standard test panels with dull and matte finish. They are produced by the Q. Panel Co. and supplied by Labomat. The application of the powder on the steel panel is realized with a GEMA PGC1 corona spray gun. Quasi-uniform powder layers are realized (approximate thickness is 70 μm). Thickness is measured on cured samples using a gauge and the gloss is measured after the curing with an Ericsen pico-glossmeter.

2.2.2. Equipment

2.2.2.1. Reflectance measurement. The measurement of the total hemispherical spectral reflectance (defined as the ratio of hemispherical reflected flow from a surface and incident flow) is not performed from zero to infinite for the real spectrum, but from 1.4 (the near visible) to 12.5 μm (where the sensor becomes less efficient). It is based on a Bruker IFS 66 vs Fourier transform infrared (FTIR) spectrophotometer, equipped with a Globar source and a KBr beam splitter and coupled with liquid nitrogen cooled mercury cadmium telluride (MCT) external detector:

- For dynamic reflectance measurements, resolution is set at $4\,cm^{-1}$ and 1250 scans are co-added to improve the signal-to-noise ratio of each spectrum.
- For static reflectance measurements, resolution is set at $4\,cm^{-1}$ and 10 000 scans are co-added to improve the signal-to-noise ratio of each spectrum.

The spectrophotometer is fitted with a substitution integrating sphere, for collecting the specularly and diffusely reflected radiations. 'Substitution' means that there is only one port for the sample and the reference standard, and that the two samples have to be measured subsequently. Conversely, comparison spheres have two ports for sample and reference standard. The inside wall of the integrating sphere is coated with a diffuse gold coating with a nearly constant reflectance (0.9865, data from Labsphere).

The relative reflectance is defined as the ratio of the intensity reflected by the sample to the intensity reflected by the standard. The sample absolute reflectance equals the relative reflectance multiplied by 0.9865 (due to the non perfect integrating sphere).

Painting samples are placed under the sample and reference port of the sphere, and the incident radiant beam is nearly normal to the powder coating surface. The total near-normal hemispherical spectral reflectance contains both the specular and diffuse components. For dynamical measurements, samples are placed on a brass medium equipped with two heating cartridges, which enables at the same time to measure the reflectance during the cure of the powder coatings and to follow the temperature imposed by the brass medium. Reflectance measurements are made on powder coatings already deposited on steel panels, so that the reflectance measurements are made in conditions similar to those used when curing the samples in our experimental infrared oven. Painting samples used in this work are first studied before curing (powder state), during curing (dynamic measurements) and after curing (cure state) at 190 °C latter and at ambient temperature.

2.2.2.2. Experimental curing process, actuator and sensor. To evaluate the performances obtained with the proposed MPC algorithm, powder samples are cured in an experimental infrared oven (Fig. 1). The upper surface of the radiator is painted in black, which enables to absorb the reflected infrared emissions; the radiator is maintained isotherm thanks to water circulation. The role of the shutter is to protect the user from dangerous radiations (only near infrared radiations are dangerous because they may contain some UV radiations). The sample holder enables the user to always put the sample at the same place thanks to a guiding rail.

In term of actuator, the infrared oven is fitted out with an infrared emitter having nine interchangeable lamps. The different

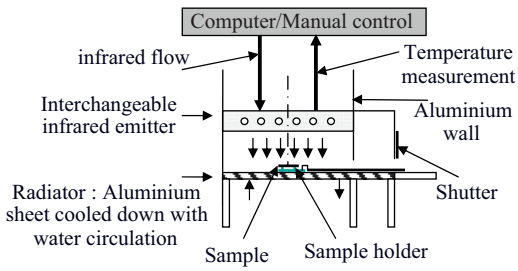

Fig. 1. Experimental infrared oven.

Table 1
Characteristics of the powder coatings used during the study (data from supplier).

	Type	Paint A	
		Black	White
		Paint A-B	Paint A-W
Physical data	Particle size (μm)	31.0–35.0	31.0–35.0
	Apparent volumic mass ($kg\,m^{-3}$)	1220	1390
Curing conditions	Electrostatic powder coating process	Corona/Tribo spray gun	Corona/Tribo spray gun
	Curing type	Infrared	Infrared
	Curing temperature and curing time	255 °C, 105 s	255 °C, 105 s
	Typical film thickness (μm)	60–70	60–70
Final coating surface aspect	Color	Satin finished-black	Glowing white
	Gloss at 60°	30 ± 3	90 ± 5

Table 2
Infrared lamps nominal characteristics.

Lamp type	Lamp voltage (V)	Filament temperature (K)	Wave of maximum emissivity peak (μm)	Lamp wattage (kW)
PHILIPS medium infrared (MWIR)	230	1750	1.66	1
PHILIPS short infrared (SWIR)	230	2500	1.16	1
PHILIPS near infrared (NIR)	230	2950	0.98	1.5

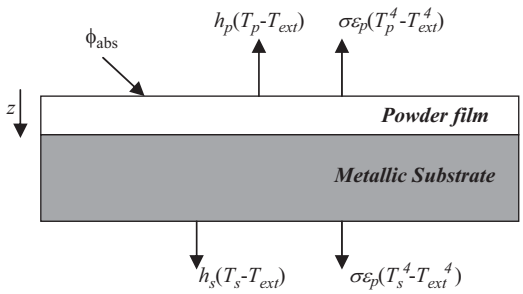

Fig. 2. Schematic drawing of the 'substrate and powder' sample (Bombard et al., 2008).

types of infrared sources are listed in Table 2. The value of the infrared flow applied during the cure may be tuned:

- manually;
- or kept constant in open loop; and
- or computed by the controller (closed loop control).

An electronic power device provided by Eurotherm Automation[2] (TC3040), principally composed of three thyristors that connect the three phase AC power grid (ranging from 0 to 230 V AC) to the lamps, controls the voltage at the connection of the lamps and hence the value of the infrared flow emitted. The infrared flow emitted $\phi_{ir}(t)$ is controlled by the phase angle triggered gates of the AC–AC converters through the manipulated control voltage of the thyristors gate (ranging from 0 to 10 V DC). In this study, even if the real control action is the thyristors gate voltage, the infrared flow emitted $\phi_{ir}(t)$ is considered as the manipulated control variable $u(t)$.

In term of sensor available during the curing for control purpose, a temperature is measured by a type K thermocouple placed under the substrate (at the lower surface of the sample). Its sensitivity is 40 μV/K and the uncertainty on the measure is 1 K. This temperature is used as the controlled variable $y_p(t)$ in our study.

The actuator and the sensor are connected to the PC through an input/output device: It is a digital/analogical MOD-MUX module of Proconel.[3] It requires a RS485 connection with a conversion to the RS232 Modbus protocol, following the Modicon format.[4]

2.3. Mathematic model and main parameter study

2.3.1. Model

The 1-D thermal model used here was previously developed in (Bombard et al., 2008). It is based on the Fourier law of heat conduction and the Fig. 2 shows the boundary conditions applied at the top surface of the powder (subscript p in the model) and at the bottom of the metallic substrate (subscript s in the model).

[2] http://www.eurotherm.tm.fr/.
[3] http://www.proconel.com.
[4] http://www.eecs.umich.edu/~modbus/documents/PI_MBUS_300.pdf.

Table 3
Nomenclature for the model parameters.

Cp	Heat capacity	$\mathrm{J\,kg^{-1}\,K^{-1}}$
e	Thickness	M
E	Spectral irradiance	$\mathrm{W\,m^{-2}\,\mu m^{-1}}$
E_a	Activation energy	$\mathrm{J\,mol^{-1}}$
ext	Exterior	Dimensionless
FF	Form factor	Dimensionless
h	Convective exchange coefficient	$\mathrm{W\,m^{-2}\,K^{-1}}$
ΔH_0	Total specific heat of the polymerization reaction	$\mathrm{J\,kg^{-1}}$
ir	Infrared	Dimensionless
k_0	Pre-exponential factor	$\mathrm{s^{-1}}$
m, n	Order of reaction	Dimensionless
p	Paint film	Dimensionless
R	Universal gas constant	$\mathrm{J\,mol^{-1}\,K^{-1}}$
s	Metallic substrate	Dimensionless
t	Time	s
T	Temperature	K
x	Conversion degree	Dimensionless
z	Spatial coordinate	m
α	Absorption coefficient	Dimensionless
α_λ	Spectral absorption coefficient	$\mathrm{\mu m^{-1}}$
ε	Emissivity	Dimensionless
ϕ	Radiative flow	$\mathrm{W\,m^{-2}}$
λ_c	Thermal conductivity	$\mathrm{W\,m^{-1}\,K^{-1}}$
λ	Wavelength	μm
ρ	Density	$\mathrm{kg\,m^{-3}}$
ρ^*_λ	Spectral reflectance	$\mathrm{\mu m^{-1}}$
σ	Stefan–Boltzmann constant	$\mathrm{W\,m^{-2}\,K^{-4}}$

The thermal balance uses both the temperature variable $T(z,t)$ varying during the time t across the thickness z of the powder coated metal sample (z=0 is the top surface), and the degree of cure conversion $x(z,t)$ (which ranges from 0^+ at the beginning to 1 at the end). Inside the powder, it leads to the following equation (the signification of the model parameters may be found in Table 3):

$$\frac{\partial T_p(z,t)}{\partial t} = \frac{\lambda_{c,p}}{\rho_p C_{pp}} \frac{\partial^2 T_p(z,t)}{\partial z^2} - \frac{e_p \Delta H_0}{C_{pp}} k_0 e^{(-E_a/RT_p(z,t))} x^m (1-x)^n \quad \forall z \in]0, e_p], \quad \forall t > 0 \tag{1}$$

where $T_p(z,t)$ is the temperature across the powder layer, which thickness is e_p. The thermal balance inside the metallic substrate leads to the following equation for the temperature $T_s(z,t)$ inside the substrate, which thickness is e_s:

$$\frac{\partial T_s(z,t)}{\partial t} = \frac{\lambda_{c,s}}{\rho_s C_{ps}} \frac{\partial^2 T_s(z,t)}{\partial z^2} \quad \forall z \in]e_p, e_p + e_s[, \quad \forall t > 0 \tag{2}$$

The first boundary condition is at the top of the painting film:

$$-\lambda_{c,p} \frac{\partial T_p(z,t)}{\partial z} = \phi_{abs}(t) - \sigma\varepsilon_p(T_p(z,t)) \cdot (T_p^4(z,t) - T_{ext}^4) - h_p(T_p(z,t) - T_{ext}) \quad \text{at } z = 0, \ \forall t > 0 \tag{3}$$

where $\phi_{abs}(t)$ is the infrared flow absorbed at the surface by the sample, which depends on the manipulated variable considered: the emitted infrared flow $\phi_{ir}(t)$ (more details are given in the following).

The second boundary condition expresses the continuity of the thermal flow at the interface e_p of the powder and the substrate:

$$-\lambda_{c,p}\frac{\partial T_p(z,t)}{\partial z} = -\lambda_{c,s}\frac{\partial T_s(z,t)}{\partial z} \quad \text{at } z=e_p,\ \forall t>0 \tag{4}$$

The third boundary condition, at the lower surface (where the temperature sensor is located), is:

$$-\lambda_s\frac{\partial T_s(z,t)}{\partial z} = -\sigma\varepsilon_s(T_s(z,t))\cdot(T_s^4(z,t)-T_{ext}^4) - h_s(T_s(z,t)-T_{ext}) \quad \text{at } z=e_p+e_s,\ \forall t>0 \tag{5}$$

The initial conditions for the dynamic equations (1) and (2) are

$$T_p(z,t)=T_s(z,t)=T_{ext} \quad \forall z\in[0,e_p+e_s],\ t=0 \tag{6}$$

Concerning the degree of cure $x(z,t)$ of the powder, the polymerization reaction is characterized by the Sesták–Berggren law (Sesták, 1984):

$$\frac{\partial x(z,t)}{\partial t} = k_0 e^{(-E_a/RT_p(z,t))}x^m(1-x)^n \quad \forall z\in[0,e_p],\ \forall t>0 \tag{7}$$

with the initial condition:

$$x(z,t)=0^+ \quad \forall z\in[0,e_p],\ t=0 \tag{8}$$

2.3.2. Evaluation of the IR flow absorbed by the paint

The state of the system described by this non-linear PDE model depends on boundary limits and, more especially on the flow $\phi_{abs}(t)$ absorbed on the surface of the painting:

$$\begin{cases} \phi_{abs}(t)=\alpha_p(T_{surf}(t))\cdot\phi_{ir}(t), & t>0 \\ T_{surf}(t)=T_p(z,t),\ z=0, & t>0 \end{cases} \tag{9}$$

with:

$$\alpha_p(T_{surf}) = \left\{\int_0^\infty E(\lambda)\cdot\alpha_{\lambda p}(\lambda,T_{surf})\,d\lambda\right\}\cdot\frac{1}{\int_0^\infty E(\lambda)\,d\lambda} \tag{10}$$

and

$$\phi_{ir}(t) = FF\int_0^\infty E(\lambda)\,d\lambda = f(u(t)) \tag{11}$$

where $\alpha_p(T_{surf})$ is the absorption coefficient of the painting at the top surface, $\phi_{ir}(t)$ the thermal radiative flow arriving on the top of paint, which is the manipulated variable of this study. $E(\lambda)$ is the spectral irradiance of the IR emitters, $\alpha_{\lambda p}(\lambda,T_{surf})$ is the spectral absorption coefficient of the painting at the surface as a function of the wavelength of the emitter lamps, and FF is the form factor used between the sample and the emitter which depends mainly on the distance between them.

2.3.3. Model parameters study

We should yet keep in mind that high temperature emitters are better to convert electrical energy in IR radiation (Carr et al., 1999), as clearly highlighted on the experimental spectral curves (Fig. 3). NIR lamps are said to be high temperature emitters (T_{lamp}=2950 K for a 230 V lamp voltage) whereas MWIR lamps are said to be low temperature emitters (T_{lamp}=1750 K for a 230 V lamp voltage). For one type of emitter, this experimental spectral curve is used to calculate the integral terms (10) and (11). It may be noted on these curves (Fig. 3) that $\alpha_p(T_{surf})$ fully depends on the type of the emitter (NIR, SWIR or MWIR) but also on the input voltage of the emitter lamps that modulates the IR flow emitted, as it can be seen from the two curves obtained with 140 and 230 V. For the MWIR emitter, we can also remark on (Fig. 3) the difference between the spectral behavior of the real emitters and the black body at the same temperature.

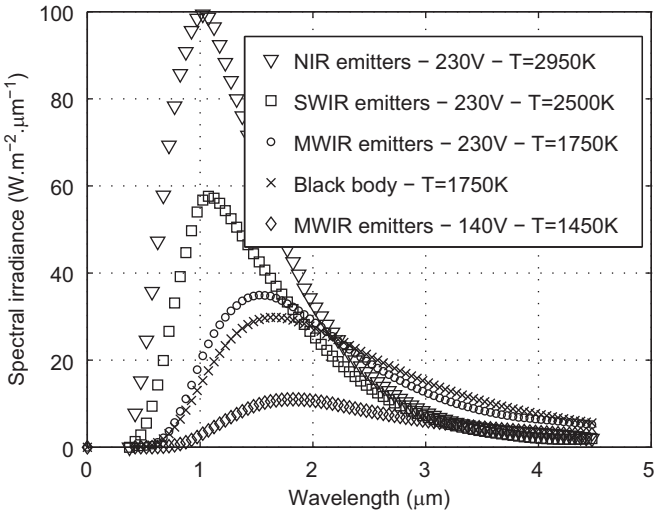

Fig. 3. Emitter spectral irradiance as a function of the emitter wavelength, emitter type and emitter lamp temperature.

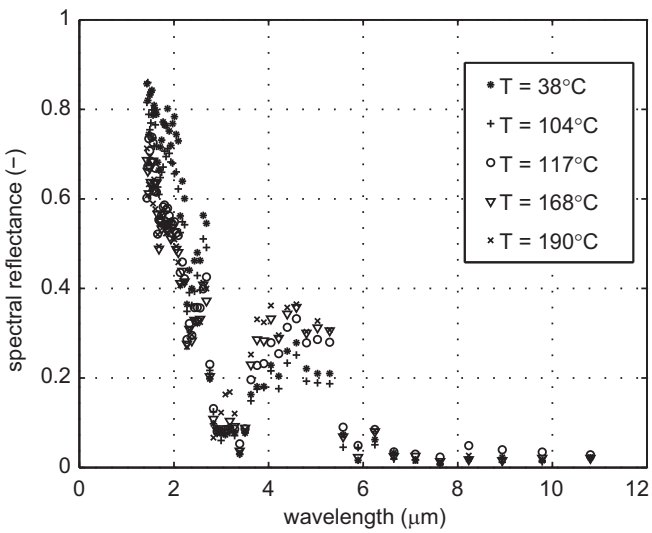

Fig. 4. Dynamic spectral reflectance during the cure as a function of the MWIR emitter wavelength and the coating temperature.

For the term $\alpha_{\lambda p}(\lambda,T_{surf})$, if we assume the paint opaque, the radiative properties are:

$$\alpha_{\lambda p}(\lambda,T_{surf}) = 1-\rho^*_{\lambda p}(\lambda,T_{surf}) \tag{12}$$

with the spectral reflectance $\rho^*_{\lambda p}(\lambda,T_{surf})$ obtained experimentally. If we observe the dynamical reflectance spectra of the painting during the cure (Fig. 4), the reflectance spectra do not evolve regularly between the spectrum of the uncured sample to the spectrum of the cured sample. The evolution is more complicated. As the result of the integration of the absorptivity (weighted by the irradiance of emitter), the absorption coefficient of the painting at the top surface $\alpha_p(T_{surf})$ is time dependant during the cure (Fig. 5), according to both the type of emitter and the cure cycle obtained by manipulating the lamps voltage.

These results show that the absorptivities are lower for the high temperature emitters because their emissions are mostly in the near infrared region where the spectral reflectances of the coatings are higher. This suggests that for a same incident heat flow on the coating surface, low temperature emitters are more effective for curing A-W thermoset coatings (Véchot et al., 2006). For this reason, in this study, we have chosen MWIR type lamps.

Nevertheless, optimizing the choice of the lamps based on the entire energy efficiency (from the electrical energy absorbed from the electrical network by the emitter, to the energy absorbed at the surface) is still to be done.

Concerning the sensitivity of the controlled temperature with respect to the model parameters, and as it can be seen from Table 4, the absorption coefficient of the painting α_p is clearly the most important parameter of the model. In this control study, one wants to show the robustness of the closed loop control of the cure with respect to the most important uncertainties of this model parameters. From a practical point of view for the control, there are two essential questions that are to be answered with this study: is it possible not to use in the model based controller, the Eqs. (9)–(11) needed to model the powder coating spectral reflectance at the top surface and the emitter spectral irradiance? Also, is it possible not to use sensors needed to evaluate on-line these two properties? In the proposed control approach, α_p is kept constant according to the color of the painting (0.95 with a black painting, 0.55 with the white painting) and since a closed loop control strategy will be used, α_p must still be seen as an unmeasured (but rather badly estimated) disturbance. The other parameters ε_p and ε_s (used in the boundary conditions (3) and (5)) are also complex to evaluate during any curing cycle since they depends on the infrared flow applied. But they have less impact than α_p and are therefore also assumed as constant values and must also be seen as an unmeasured (or rather badly estimated) disturbance. These properties are not measured on-line.

Some values of the model parameters are known very easily: the thermo physical properties of the paint were provided by our paint supplier. The thermo physical properties of the substrate are found in the literature. For the chemical conversion, the model is validated and more details about it may be found in Bombard et al. (2006) and Véchot et al. (2006).

This model belongs to a general class of one dimensional non-linear parabolic PDE with boundary control with some uncertain model parameters, and is summarized as follows:

$$(S_{NL})\begin{cases} \dfrac{\partial x_m(\zeta,t)}{\partial t} = F_d(x_m(\zeta,t)),\ \forall\zeta\in\Omega, & t>0 \\ F_b(x_m(\zeta,t),u(t)) = 0,\ \forall\zeta\in\partial\Omega, & t>0 \\ x_m(\zeta,0) = x_m^0,\ \forall\zeta\in\Omega\cup\partial\Omega, & t=0 \\ y_m(t) = Cx_m(\zeta,t),\ \forall\zeta\in\Omega\cup\partial\Omega, & t>0 \end{cases} \tag{13}$$

where ξ is the independent space variable, Ω the spatial domain and $\partial\Omega$ is its boundary, t the independent time variable. x_m the model state belonging to an adequate infinite dimensional state space, u the one dimensional control signal (or manipulated variable), y_m the model output, F_d and F_b are non-linear operators and C is a linear operator.

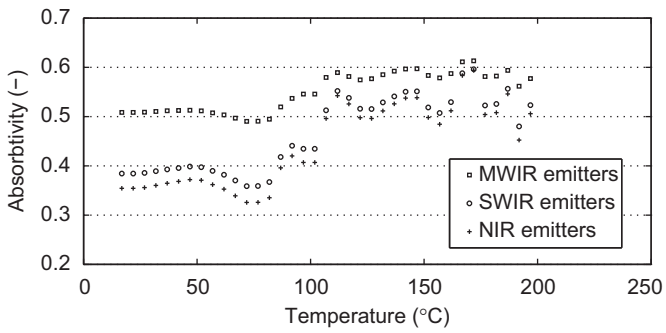

Fig. 5. Absorptivity at the surface of the painting as a function of the emitter type and of the coating temperature (cure under 230 V lamps voltage).

3. Control of the painting coating process

3.1. Control objectives

The objective of this part is to show how a MPC may be useful to control on-line such a painting curing process modeled by a PDE system, and how the uncertainty on the unmeasured absorption coefficient at the top surface is well handled by such closed-loop controller. The aim of the experimental study is to evaluate the robustness of the proposed model based controller with respect to model uncertainties; in other words: is it possible to have a simple tuning of both the model and the controller such that the control objectives are satisfied in spite of the possible change of color of the painting from one experiment to another? In term of control objective, a prescribed trajectory tracking problem under input and output constraints is specified. This allows comparing the process output obtained with the model based controller with the known prescribed reference behavior y_{ref}.

3.2. Control of PDE systems

In control theory, due to the complexity of the problem, relatively few studies are devoted to the control of processes explicitly characterized by a PDE model, especially in the non-linear case. Indeed, a balance has to be found between the infinite dimensional representation of such model and the possibilities to implement a finite dimensional controller (in order to be technically feasible). Usually, theoretical studies keeping the initial infinite dimensional PDE model are focusing on the existence and unicity of the model solution and also on the solution of a control problem based on this model (Guo et al., 2008; Zong, 2008). Here, since we are interested in the real time control of a non-linear PDE model based process, we are focusing on finite dimensional approaches. There are two ways to implement a finite dimensional controller for an infinite dimensional system: the first one is to keep the infinite dimensional

Table 4
Variation of the model temperature and extent of conversion during the cure at constant infrared flow induced by a variation of $\pm 20\%$ of some parameters of the model (Bombard et al., 2008).

Temperature (°C)					Degree of conversion				
<1	1–5	5–10	10–20	>20	<0.001	0.001–0.01	0.01–0.05	0.05–0.1	>0.1
$\lambda_{c,s}$	$\lambda_{c,p}$		ρ_s	α_p	$\lambda_{c,s}$	$\lambda_{c,p}$	ε_p	ρ_s	α_p
e_p	h_p		Cp_s		e_p	h_p	h_s	Cp_s	
ε_s	T_{ext}		e_s		ε_s	T_{ext}		e_s	
ρ_p	h_s		ε_p			ρ_p			
Cp_p						Cp_p			

representation of the PDE model, synthesize an infinite dimensional controller, and find a finite approximation of this controller. But since more control tools exist in finite dimension, the second way is most of the time used; it consists in first constructing a finite approximation of the model and synthesizing a finite dimensional controller. Even if various finite dimensional methods are proposed to control such distributed parameter systems, there is no general framework yet. The original PDE model is usually simplified into an ODE model based on: finite differences method, finite volume method, orthogonal collocation method, Galerkin's method, or on modal decomposition. Many results exist with these approximation techniques. In Christofides and Daoutidis (1997), non-linear finite-dimensional output feedback controllers are given for systems of quasi-linear parabolic PDEs with distributed control, for which the eigenspectrum of the spatial differential operator can be partitioned into a finite-dimensional slow one and an infinite-dimensional stable fast complement. In Baker and Christofides (2000), a three step finite dimensional approximation was used for non-linear parabolic PDEs with distributed control. More recently, in Dubljevic et al. (2006), a number of MPC formulations was shown for the distributed control of linear parabolic PDEs with state and input constraints. In Dubljevic and Christofides (2006), a modal decomposition technique was used to decompose the system into a finite dimensional (slow) subsystem coupled with an infinite dimensional (fast) subsystem. Various state feedback predictive controllers were then designed. In Damak (2007), it was shown how it was possible to design an asymptotic estimator of state and time-varying parameters in the case of a non-linear distributed parameter bioreactor. The structure of the estimator was based on an approximated model of the bioreactor behavior by orthogonal collocation. In Ravindran (2007), the optimal boundary feedback stabilization of Navier–Stokes equations using model reduction has been presented. The model reduction was carried out using a combination of proper orthogonal decomposition (POD) and Galerkin projection, and used for the optimal linear quadratic regulator (LQR) synthesis. In Li and Christofides (2008), two computationally efficient approaches were presented for the optimal control of diffusion–convection reaction processes described by parabolic PDEs subject to Danckwerts boundary conditions. It was based on reduced-order models combined with a LQR. In Christofides et al. (2008), an overview of recently developed control methods for PDE based models was presented, with examples on crystallization, aerosol and thermal spray. In Maidi et al. (2009), a PDE model combined with differential geometry has been applied to compare two boundary control strategies for the temperature of the liquid fluid at the outlet of a heat exchanger. In Padhiyar and Bhartiya (2009), the control of the spatial property profile was discussed, since the endpoint itself is a manifestation of the reaction path and a particular path adopted may offer advantages over others. Based on a MPC formulation, a lexicographic optimization was used to prioritize the different sections of the profile when an unachievable target profile was specified. Cascaded continuous stirred tank reactors were used to approximate the model of a pulp digester. In Aggelogiannaki and Sarimveis (2008), a radial basis function neural network architecture was used to model the dynamics of distributed parameter systems and was combined with a singular value decomposition to decrease the model order.

3.3. Model predictive control

Among the finite dimensional controllers, model predictive control is one of the most popular (Qin and Badgwell, 2003). Model-based predictive control (MBPC) is also named model predictive control, or receding horizon control (RHC). It is a particular class of optimal controller. The idea of model predictive control began in the 1960s (Propoi, 1963). However, a real interest started to emerge in the 1980s after publication of the first papers on identification-command (IDCOM) by Richalet et al. (1978) and on dynamic matrix control (DMC) (Cutler and Ramaker, 1980). Quadratic DMC (QDMC) by Cutler et al. (1983) was later able to handle constrained optimization problems. Generalized predictive control (GPC) by Clarke et al. (1987a, b) was intended to offer a new adaptive control alternative. Thousands of industrial applications of MPC exist today, for example in the chemical and petrochemical industries: MPC has become the second control paradigm in the history of control after the PID. The first main advantage is that constraints (due to: manipulated variables physical limitations, operating procedures or safety reasons, etc.) may be explicitly specified into this formulation. The second main advantage of MPC is its ability to address long time delays, inverse responses, significant non-linearities, multivariable interactions. In order to control a process with a model, an experimental response of the process may be enough, but for complex systems, it is better to model the process at a fundamental level. The widespread use and success of MPC applications described in the literature attests the improved performance of MPC for control of difficult process dynamics. Many MPC approaches have therefore been proposed along the past three decades, most of them based on a receding-horizon strategy, i.e., at each current sampling instant k the following actions are taken:

- the plant measurements are updated for use in the feedback/feedforward control loop;
- the plant model is used to predict the output response to a hypothetical set of future control sequence;
- a function including the cost of future control actions and future deviations from a reference behavior is optimized to give the best future control sequence; and
- the first movement of the optimal control sequence is applied on the process.

These operations are repeated at time $k+1$.

However, if the model exhibits a non-linear behavior, a numerical solution technique must be used to solve this optimal problem. The computational effort varies somewhat because some solution methods require only that a feasible (and not necessarily optimal) solution should be found or that only an improvement should be achieved from time step to time step. Nevertheless, compared to the linear case, the numerical effort is usually important and the algorithm may have some difficulties to find a feasible solution. It may lead to unpredictable consequences for the closed loop performances. The computational effort can be greatly reduced when the system is linearized first in some manner and then the techniques developed for linear systems are employed on-line subsequently. Nevistic (1997) showed excellent simulation results when a linear time varying (LTV) system approximation is used, which was calculated at each time step over the predicted system trajectory (Lee and Ricker, 1994). In (Zheng, 1997, 1998), works the non-linear MPC control law was approximated by a linear controller which linearized the non-linear model but assumed that no constraints exist. Therefore, a linear approach may be an interesting solution to have an acceptable computational effort, especially if the sampling period is short. A linearization of the model is used in our study. In De Temmerman (2008), the strategy adopted was to use a linearized model instead of a non-linear PDE model in a MPC approach: the control performances were quite similar, while the computational time was decreased by a factor 5. What is more, whereas the

Table 5
Nomenclature for the control approach.

d	Unconstrained manipulated variable
d_0	Unconstrained manipulated variable for S_0
Δd	Unconstrained manipulated variable for S_{TVL}
e	Output error
F_b, F_d	Nonlinear operators
g_i	Output constraints
h_1, h_2, h_3 h_4, h_5, $h_{2.mean}$, $h_{2.max}$, $h_{2.min}$, $h_{2.magn}$	Functions
j	Discrete time index in the future
k	Actual discrete time index
J	Cost function
J_{ext}	Exterior penalty function
J_{tot}	Total penalized cost function
l	Iteration index in the algorithm
n	Number of output constraints
N_k	Number of time samples considered
N_p	Prediction horizon, dimensionless
RMSET	Root mean square error for tracking, K
RMSEM	Root mean square error for modeling, K
S_{NL}	Nonlinear model
S_0	Nonlinear model computed off-line
S_{TVL}	Time-varying linearized model computed on-line
t	Time, s
Te	Sampling time, s
u	Manipulated variable
Δu_{min}	Minimum variation allowed for the manipulated variable during one sample time
Δu_{max}	Maximum variation allowed for the manipulated variable during one sample time
u_{min}	Minimum magnitude allowed for the manipulated variable
u_{max}	Maximum magnitude allowed for the manipulated variable
u_0	Manipulated variable for S_0
Δu	Manipulated variable for S_{TVL}
w_i	Penalty weight
x_m	Model state
x_m^0	Initial condition for the model state at t=0
Δx_m	Model state for S_{TVL}
y_m	Model output
y_0	Model output for S_0
Δy_m	Model output for S_{TVL}
y_p	Process output
y_{ref}	Reference behavior
$\nabla.$	Gradient operator
$\nabla^2.$	Hessian operator
λ	Control algorithm parameter
$\partial\Omega$	Boundary of the spatial domain
Ω	Spatial domain
ζ	Space variable, m

non-linear approach was not implementable, the linearized model based control approach was implementable for a drying process featuring a 60 s sampling time.

3.4. Proposed model predictive control formulation for a PDE system

A time-varying linearized PDE model based predictive control algorithm detailed in Dufour et al. (2003) is used for this research. In previous experimental control of PDE systems (painting drying in Dufour et al., 2003; pasta drying in De Temmerman et al., 2009), it has been shown how this special MPC framework may be used for the control of such PDE system, in spite of the infinite dimensional aspect of the initial model and the non-linearity of the model state. In De Temmerman et al. (2009), it was shown how MPC led to better performances than PID. In De Temmerman (2008), the closed loop control performances using either a off-line non-linear model and a coupled on-line linearized model, or an on-line non-linear PDE model in the MPC approach were quite similar. Whereas the non-linear approach was not implementable, the linearized model based control approach was implementable for a drying process featuring a 60 s sampling time: the computational time was indeed decreased by a factor 5 in the linearized case.

The main ideas of this control algorithm are briefly reminded in this part.[5] To provide an insight into the process, it is necessary to solve the PDE model in finite dimension, and then synthesize a MPC. This controller is designed such that the calculation time is smaller that the small sampling time (a few seconds). This controller is built as a compromise between the small calculation time allowed, and the accuracy of the model used in the on-line model based optimization problem to solve, and the accuracy of the solution found in the iterative procedure. Moreover, unfeasibility of the output constraint is also handled, such that the less bad solution is found.

In this framework, the initial general optimization problem is formulated into the future over a receding horizon Np, where the cost function J aims to reflect any control problem (trajectory tracking, processing time minimization, energy consumption minimization, etc.):

$$\min_u J(u) = \sum_{j=k+1}^{j=k+Np} (h_0(y_{ref}(j), y_p(j), u(j)) \tag{14}$$

where k is the actual discrete time (t=k*Te), Te the sampling time, j the future discrete time index. y_p the process controlled output that has to follow as best as possible the prescribed reference behavior y_{ref}. This optimization problem cannot yet be solved, since it requires the process measures y_p into the future, which is not possible. This issue is handled through an approximation based on the used of the internal model closed loop control structure, where the control u is applied on both the process and the model, and where the feedback term is

$$e(k) = y_p(k) - y_m(k), \quad \forall k > 0 \tag{15}$$

Assumption 1. In order to forecast the process output y_p into the future j, it is assumed that the error $e(j)$=$y_p(j)-y_m(j)$ is constant into the future: $e(j)$=$e(k)$ is obtained after each update of the measure at time k.

Based on the Assumption 1 and on the introduction of the internal model control closed loop structure, the optimization problem is now computationally solvable, since it is based on the feedback term $e(k)$ and on the model response in the future $y_m(j)$ obtained with the model (13):

$$y_p(j) = y_m(j) + e(k), \quad \forall k > 0, \ \forall j \in [k+1, k+Np] \tag{16}$$

The optimization problem can now be numerically solved:

$$\min_u J(u) = \sum_{j=k+1}^{j=k+Np} (h_1(y_{ref}(j), e(k), y_m(j), u(j)) \tag{17}$$

Concerning the n general output constraints g_i related to operating conditions, safety, quality, they are formulated as inequality constraints on the measured or estimated output (and the input if needed):

$$g_i(y_p(j), u(j)) \le 0, \quad \forall j \in [k+1, k+Np], \ \forall i \in I^n = \{1, \ldots, n\} \tag{18}$$

Based on the Assumption 1 and on the internal model control closed loop structure, the n general output constraints g_i are reformulated, based on the feedback term $e(k)$ and on the model response in the future $y_m(j)$ obtained with the model (13):

$$g_i(e(k), y_m(j), u(j)) \le 0, \quad \forall j \in [k+1, k+Np], \ \forall i \in I^n = \{1, \ldots, n\} \tag{19}$$

[5] The nomenclature for the control approach is given in Table 5.

The idea of the proposed approach is to transform the initial PDE model based constrained problem into a ODE model based unconstrained problem, such that the time needed to solve the on-line optimization problem is less than the sampling time. Based on this approach, the output constraints g_i are handled in the optimization problem through the penalty term J_{ext}, based on the exterior penalty method (Fletcher, 1987):

$$J_{ext}(u) = \sum_{j=k+1}^{j=K+Np} \left(\sum_{i=1}^{i=n} (w_i \max^2(0, g_i(e(k), y_m(j), u(j))) \right) \tag{20}$$

where w_i is an adaptive positive defined weight. The advantage is that case where a constraint is not satisfied can be handled. The cost function J and the penalty term J_{ext} are then combined into J_{tot} to formulate the constrained penalized optimization problem:

$$\min_u J_{tot}(u) = J(u) + J_{ext}(u) \tag{21}$$

where the manipulated variable u of the process is the constrained optimization argument in the optimization task:

$$\begin{cases} u_{min} \le u(k) \le u_{max}, & \forall k > 0 \\ \Delta u_{min} \le u(k) - u(k-1) \le \Delta u_{max}, & \forall k > 1 \end{cases} \tag{22}$$

The constrained optimization argument u is transformed into the unconstrained optimization argument d: it is obtained from a simple hyperbolic transformation of the magnitude and velocity constraints specified for the manipulated variable u (Dufour et al., 2003):

$$u(k) = h_2(d(k) = h_{2.mean} + h_{2.magn} \tanh\left(\frac{d(k) - h_{2.mean}}{h_{2.magn}}\right), d(k) \in \mathbb{R}, \quad k > 0 \tag{23}$$

where $h_{2.mean}$ and $h_{2.magn}$ are updated at each time k according to the control action $u(k-1)$ found at the previous discrete time $k-1$:

$$\begin{cases} h_{2.mean} = \dfrac{h_{2.max} + h_{2.min}}{2} \\ h_{magn} = \dfrac{h_{2.max} - h_{2.min}}{2} \\ h_{2.max} = \min(u_{max}, u(k-1) + \Delta u_{max}), \quad k > 1 \\ h_{2.min} = \max(u_{min}, u(k-1) + \Delta u_{min}), \quad k > 1 \end{cases} \tag{24}$$

The drawback is that this transformation introduces a strong decrease of the sensitivity of the cost function with respect to the optimization argument when u tends to its limits. One of the advantage of such transformation is that the function h_2 (22) is linear when $u(k)$ tends to $u(k-1)$, i.e. when small changes in the control action is needed. The optimizer argument d is finally used in an on-line penalized unconstrained optimization problem:

$$\min_d \quad J_{tot}(d) = J(y_{ref}(j), e(k), y_m(j), d(j)) + J_{ext}(e(k), y_m(j), d(j)) \tag{25}$$

Moreover, in order to decrease again the on-line computational time, the argument of the optimization is assumed to be the same into the future:

$$d(j) = d(k), \quad \forall j \in [k+1, k+Np] \tag{26}$$

Widely known and used for its robustness and convergence properties, the Levenberg–Marquardt's algorithm is used here and the optimization argument is determined iteratively at each sample time k using the process measurement (or estimation), the model prediction and the cost function J_{tot}. The drawback is that it allows finding a local solution, which may not be a global solution. Moreover, the Hessian required by this method is approximated at the first order.

From a practical point of view, the next step in this problem is to reduce the computational time needed to solve the unconstrained optimization problem during the sampling period. A linearization method of the non-linear PDE model around a similar non-linear PDE model chosen and computed off-line is used. The system (S_{NL}) is first solved off-line with a particular choice of its input $u(t)=u_0(t)$, which leads to the solution (S_0). The relation between the small input variations Δu, the small state variations Δx_m and small output variations Δy_m about this particular solution (S_0) of the (S_{NL}) may be described by the time varying linearized model (S_{TVL}). More details about the relations between the formulation of (S_{TVL}) and (S_{NL}) may be found in Dufour et al. (2003). According to the hyperbolic transformation and the linearization, the input Δu of the on-line model (S_{TVL}) is also replaced by the unconstrained parameter Δd (more details may be found in Dufour et al., 2003). Finally, the off-line solved non-linear PDE model and the on-line solved time varying linearized PDE model replace the non-linear model that is initially to be solved on-line.

In order to be able to calculate y_m into the future as required by the cost function (24), these PDE models are approximated in finite dimension by a discretization technique. Furthermore, the discretization in finite dimension is an essential step for the simulation of the model into the future. In order to decrease the time needed to solve the model used on-line, the number of points in the discretization scheme for (S_{TVL}) and (S_0) is also decreased, such that the finite approximation of the solution of the PDE model is less accurate (in open loop). In the meantime, this approximation is compensated by the closed loop control approach that is still able to reach the specified closed loop performances, like in (Dufour and Touré, 2004).

The final internal model structure with MPC (IMC-MPC) structure is given in Fig. 6. The control objective is then to find on-line the variation Δd (hence Δu) of the variable d (hence the manipulated variable u) about a well chosen trajectory d_0 (hence u_0) that improves at each sample time the on line optimization result. The final unconstrained penalized control problem to solve is, at each discrete time k:

$$\min_{\Delta d} J_{tot}(\Delta d) = \sum_{j=k+1}^{j=k+Np} h_3(y_{ref}(j), e(k), y_p(k), \Delta y_m(j, \Delta d(k)), u(\Delta d(k)) \tag{27}$$

with the iterative modified Levenberg–Marquardt based algorithm:

$$\Delta d^{l+1}(k) = \Delta d^l(k) - (\nabla^2 J^l_{tot}(k) + \lambda I)^{-1} \nabla J^l_{tot}(k) \tag{28}$$

where $\nabla J^l_{tot}(k)$ and $\nabla^2 J^l_{tot}(k)$ are the criteria gradient and criteria Hessian with respect to Δd at the iteration l at the time k.

Therefore, various approximations or assumptions are introduced at different levels of the control approach (either for the modeling part, or for the search method of the optimal solution) to tune on-line the control action:

1. during the modeling: first, a model is never perfect. Additional assumptions may be specified to obtain an usable model for the model based control approach;
2. during the modeling, some assumed constant parameters may be uncertain, and/or in fact time varying;
3. in order to decrease the on-line computational time, the initial non-linear PDE model is approximated in two steps: an non-linear solution is solved off-line, which is the base of the time varying linearized PDE model computed during the on-line optimization task;
4. in order to have an implementable finite dimensional controller, the PDE models are approximated in finite dimension;
5. in order to decrease the on-line computational time, the number of points in the discretization grid used for the resolution of (S_{TVL}) and (S_0) is decreased;

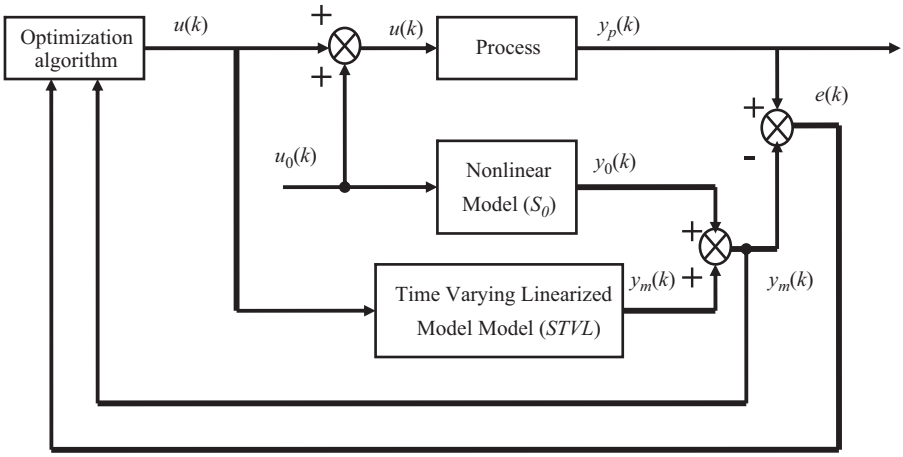

Fig. 6. Control structure (Dufour et al., 2003).

6. in the predictive approach, the error between the process output and the model output is assumed constant (but update at each time k by the last process measurements). It is used as the feedback term;
7. in the iterative optimization, the optimization argument is assumed constant into the future: a step function is sought;
8. in the iterative optimization, the Levenberg–Marquardt based algorithm does not allow to find a global solution, but only a local solution; and
9. in the iterative optimization, in the Levenberg–Marquardt based algorithm, the second order term is approximated at the first order.

Since the closed loop model based control approach is based on several assumptions and approximations, it has to present good robustness properties, which must be underlined under simulations first, and under experimental validation.

3.5. Simulation results and discussion

3.5.1. Control software: main features of MPC@CB

A software developed with Matlab[6] is used: MPC@CB.[7] It allows realizing the MPC under constraints of a continuous process. The originality of these codes is first the ease of their use for any continuous SISO process (single input single output), through the user files (where model equations have to be specified) that are synchronized by few main standards files (where the user has to make few (or no) changes). The model has to be given under the form:

$$\begin{cases} \dot{s} = f(s,u) \\ y = g(s) \end{cases} \tag{29}$$

i.e., there are any number of state variables in this SISO model, it may be linear or not linear, time variant or time invariant, based on ODE and/or PDE.

Another original feature of the software is the straightforward resolution of various model based control problems through different choices:

- MPC for a trajectory tracking problem, with or without the output constraint. The user may specify any reference trajectory;
- MPC to solve an operating time minimization problem, with or without the output constraint;
- in order to study the robustness of the control law, it is easy to introduce, for any model parameter, different values in the model (used in the controller) and in the simulated process. The simulated process and the model may be described by the same (or different) set of equations and by the same (or different) set of parameters;
- possibility to introduce a cascaded process (which input is the output controlled by the software); and
- possibility to specify any condition to stop the run before the final time.

The other originality is the method used to develop the codes: it is very easy to introduce new parts in the code, such as:

- MPC with a user defined problem.
- Handle SIMO, MISO or MIMO model.
- Introduce a software sensor (observer).
- Apply the software for a real time application.

Until now, other applications have used MPC@CB: lyophilization of vials (Daraoui et al., 2008), polymer reactor (Da Silva et al., 2008), painting curing (Flila et al., 2008) and a pasta dryer (De Temmerman, 2008; De Temmerman et al., 2009).

3.5.2. Experimental conditions

Three parameters have been selected to run several experiments in the experimental IR oven:

- the color of the real painting: black or white painting may be used;
- the tuning of the absorption coefficient α_p (Table 6): t is used as a model parameter inside the controller. This will introduce the main model uncertainty. The mean value is not the value of the absorption coefficient for a given painting, but is just the mean value calculated between the value of the absorption coefficients of the black painting and the white painting. According to one of these 3 tuning, we will later refer to the black painting model, the white painting model or the mean model; and

[6] http://www.mathworks.com/.

[7] © University Claude Bernard Lyon 1—EZUS. In order to use MPC@CB, please contact the author: dufour@lagep.univ-lyon1.fr. Visit the website dedicated to this software: http://MPC-AT-CB.univ-lyon1.fr.

Table 6
Tuning of the absorption coefficient α_p in the model.

Black painting model (dimensionless)	White painting model (dimensionless)	Mean model (dimensionless)
0.95	0.55	0.75

- the tuning of the control horizon *Np* in the MPC, since it is the classical main tuning parameter of this kind of controller.

The sampling time is 1 s.

3.5.3. Control objectives

In term of control objectives, a prescribed trajectory tracking problem under input and output constraints is specified. This allows comparing the process output obtained with the model based controller with the known prescribed reference behavior y_{ref}. The control objectives are defined as:

- The temperature measure available is considered as the process output: $y_p(t) = T_p(e_p + e_s, t)$. It has to track as best as possible a specified time-dependant reference temperature trajectory $y_{ref}(t)$. Any trajectory may be specified, but since it is usually specified in industrial use, it is defined by a ramp, a constant threshold, a second ramp, and a second constant threshold. Therefore, the cost function involved in the optimization problem (14) is defined as

$$J(u) = \sum_{j=k+1}^{j=k+Np} (y_{ref}(j) - y_p(j))^2 \tag{30}$$

- In order to evaluate the ability of the controller to handle output constraints defined as (18), the process output shall not exceed a maximum value, which is arbitrary chosen equal to less than the second constant value of the reference temperature trajectory:

$$y_p(t) = T_p(0, t) \le y_p^{\max} = 450\,\mathrm{K} \tag{31}$$

In some sense, the controller has to tune on-line the infrared flow such that the process output tracks the specified solution: the constrained reference y_{ref_const}:

$$y_{ref_const}(t) = \min(y_{ref}(t), y_p^{\max}) \tag{32}$$

- The infrared flow $\phi_{ir}(t)$, acting as the manipulated variable $u(t)$ which is computed by the controller, has to be physically applicable. This is handled by input constraints (22) on the magnitude and velocity of the infrared flow:

$$\begin{cases} 0 \le u(t) \le 23500\,\mathrm{W\,m^{-2}} \\ -10000\,\mathrm{W\,m^{-2}\,s^{-1}} \le \dfrac{du(t)}{dt} \le 10000\,\mathrm{W\,m^{-2}\,s^{-1}} \end{cases} \tag{33}$$

3.5.4. Experimental results

Several analyses are detailed in this part: first, the impact of the two model based controller tuning parameters (the horizon prediction and the modeled absorption coefficient at the top surface) on the closed loop control objectives is presented for the white and for the black painting. Then, the results between white and black paintings are globally compared. In order to compare the experiments, we use two root mean square errors (RMSE):

- the RMSE for the tracking (RMSET) which represents the RMSE between the constrained reference and the process output and
- the RMSE for the modeling (RMSEM) which represents the RMSE between the process output and the model output.

They are defined as:

$$\begin{cases} RMSET = \displaystyle\sum_{k=1}^{k=N_k} \left(\sqrt{\frac{(y_{ref_const}(k) - y_p(k))^2}{N_k}} \right) \\ RMSEM = \displaystyle\sum_{k=1}^{k=N_k} \left(\sqrt{\frac{(y_p(k) - y_m(k))^2}{N_k}} \right) \end{cases} \tag{34}$$

where k is the discrete time t at the current sampled time and N_k the number of samples of the considered experiment.

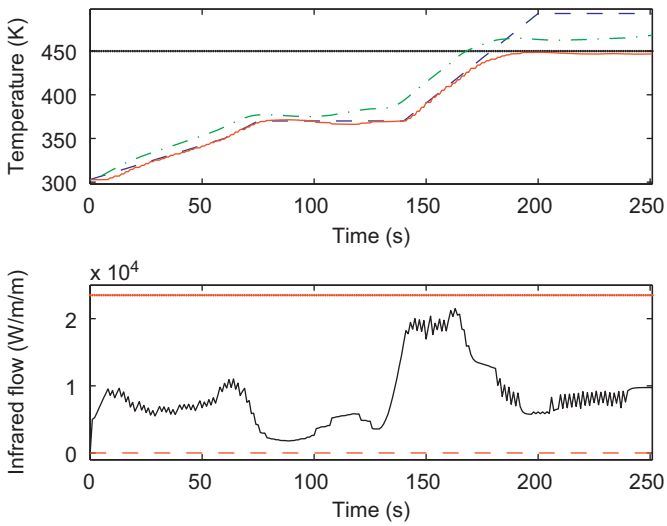

Fig. 7. White painting: results with the best RMSET. Top: trajectory tracking: reference (dash), maximum allowed (+), measure (solid), model (dash dot) and bottom: control action: minimum allowed (dash), control applied (solid), maximum allowed (+).

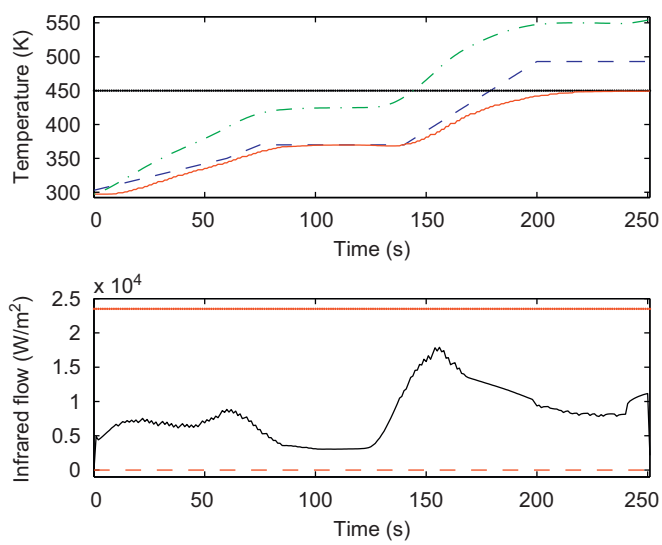

Fig. 8. White painting: results with the worst RMSET. Top: trajectory tracking: reference (dash), maximum allowed (+), measure (solid), model (dash dot) and bottom: control action: minimum allowed (dash), control applied (solid), maximum allowed (+).

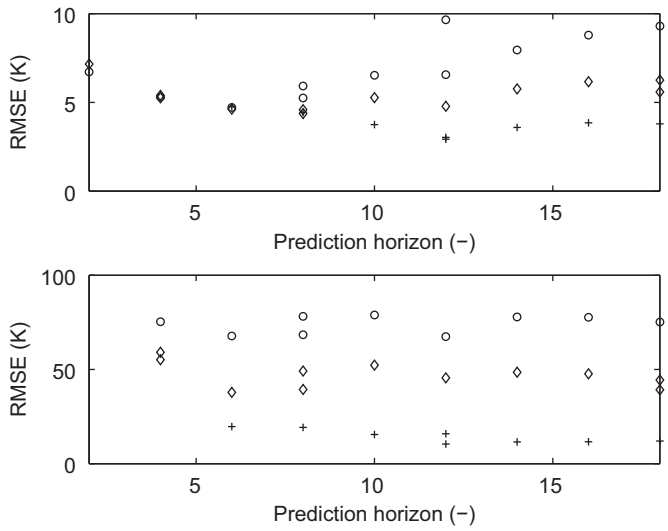

Fig. 9. White painting: influence of the tuning of the prediction horizon over the RMSET (top) and RMSEM (bottom). Legend for the painting absorption coefficient tuned in the model: o (black), diamond (mean), + (white).

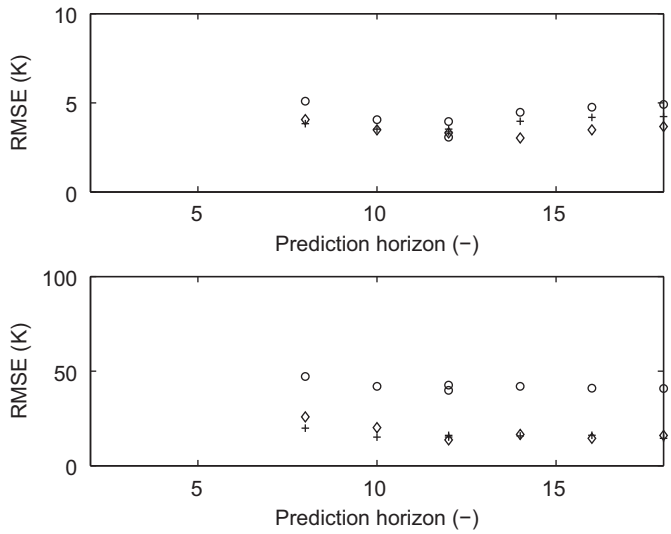

Fig. 10. Black painting: influence of the tuning of the prediction horizon over the RMSET (top) and RMSEM (bottom). Legend for the painting absorption coefficient tuned in the model: o (black), diamond (mean), + (white).

3.5.4.1. Experiments on white paintings. The first set of experiments deals with the white painting. In terms of trajectory tracking, the best experiment is obtained with the white model and a prediction horizon of 12, which leads to the RMSET=3 K (Fig. 7). The worst experiment is obtained with the black model and for a prediction horizon of 18, which leads to the RMSET=9 K (Fig. 8). The importance of the modeling for MPC is clearly underlined in these two experiments: let us have a look on a time interval where there is no discontinuity in the optimization problem defined on the control horizon. In Fig. 7, the tracking is efficient between 40 and 70 s; the modeling error $e(k)$ is indeed almost constant and Assumption 1 is fulfilled. The modeling into the future is therefore accurate which leads to an efficient tracking. For the same interval, increasing the control horizon from 12 to 18 and choosing the black model makes the tracking less efficient. Indeed, the modeling error $e(k)$ is no more constant (Fig. 8) and Assumption 1 is no more fulfilled. The modeling is therefore not accurate which leads to a bad tracking.

Concerning the prediction horizon, there is almost for the three models (white, black, mean) a convexity in the tuning (Np=8 or 12) to get the best tracking results (top of Fig. 9): if the horizon is too small, the dynamic behavior is not sufficiently presented in the optimizer, whereas a large horizon prediction introduces too many modeling errors into the optimizer.

Concerning the tuning of the painting absorption coefficient in the model used in the MPC, for the same prediction horizon tuning larger than 6, the RMSET with the white model is always better than the one with the mean model, which in turn is better than the RMSET obtained with the black painting model (bottom of Fig. 9): the more the color assumed in the model deviates from the real color, the more the tracking error is. Therefore, the structure of the closed loop control impacts the real value of the absorption coefficient of the painting: Indeed, due to this uncertainty, the difference between the process output and the model output (used in the MPC) increases from around RMSEM=10–20 K (for the white model) to around RMSEM=70–80 K (for the black model) as it can be seen at the bottom of Fig. 9. In the meantime, the RMSET increases from the order 3–5 K (for the white model) to 5–10 K (for the black model) as it can be seen at the top of Fig. 9. The conclusion is that the use of the white model, based on a constant value for the painting absorption coefficient, leads to a robust closed loop control of the white painting curing in spite of the time dependency of the real painting absorption coefficient.

3.5.4.2. Experiments on black paintings. The second set of experiments deals with the black painting. In term of trajectory tracking, the best experiment is obtained with the mean model and with a prediction horizon of 14, which leads to the RMSET=3 K. The worst experiment is obtained with the black model and with a prediction horizon of 8, which leads to the RMSET=5 K. For the three models, there is a convexity in the tuning of the prediction horizon (Np=12 or 14) to get the best tracking results (top of Fig. 10).

Concerning the tuning of the painting absorption coefficient in the model, for the same prediction horizon tuning, the results obtained with the black model are always the worst, although this is the real color of the painting! That is a real unexpected behavior. Therefore, like for the white painting, the structure of the closed loop control impacts the real value of the absorption coefficient of the painting, whereas this value is still assumed constant in the model. Due to this uncertainty, the difference between the process output and the model output (used in the MPC) increases from around a RMSEM=15–20 K (for the mean or white model) to a RMSEM=40–45 K (for the black model) as it can be seen at the bottom of Fig. 10. In the meantime, the RMSET increases from around 3–4 K (for the mean or white model) to 4–5 K (for the black model). The conclusion is that the black model (based on a constant value for the painting absorption coefficient) is therefore not the best model to use to control the black painting sample.

3.5.4.3. Global comparison of the experiments. Let us now compare globally the set of experiments:

- According to the RMSET, the MPC is more robust for the black painting than for the white painting, since the uncertainty of the modeled painting absorption coefficient has less impact in closed loop for the black painting than for the white painting. Indeed, for the white painting, from the worst model to the best model, the RMSEM ranges between 80 and 10 K, whereas the RMSET ranges from 10 to 3 K. For the black painting, from

the worst model to the best model, the RMSEM ranges between 45 and 15 K, whereas the RMSET ranges from 5 to 3 K. The mean of all RMSETs for the white painting is around 6 K, whereas the mean of all RMSETs for the black painting is around 4 K.

- On one side, the closed loop controller can be seen as the source of the disturbance in the computation of the model into the future time window, since the RMSEM increases between the open loop validation made with a constant emitter infrared flow (Bombard et al., 2008) and the current closed loop results. On the other side, in spite of the RMSEM obtained in closed loop, the controller is again sufficiently robust to tune the infrared flow such that the process output tracks efficiently the prescribed time dependant reference, thus leading to good RMSETs. According to the infrared flow trajectory applied (bottom of Figs. 7 and 8), it is obvious that such tracking is not possible manually without automatic feedback.
- Best closed loop control results could be obtained since the best RMSET is always around 3 K and since the uncertainty on the measure is 1 K. According to the results obtained with the black painting, the tuning of the painting absorption coefficient in the model cannot be done a priori based on the constant values obtained off-line and on the choice of the color of the real painting. Since the infrared flow applied in the closed loop control strategy is time-dependant, it impacts a lot the value of the real painting absorption coefficient. This is less obvious for the white painting, since the best results are obtained with the white model. If another color was used, the problem would have to be stated. In order to improve the tracking, it would therefore be of great interest to use observer techniques to estimate on-line the value of the time dependant painting absorption coefficient. This estimate could then be fed on-line in the MPC to decrease the RMSEM and hence improve the control results in terms of RMSET, like in Edouard et al. (2005). This on-line estimation would be of great interest in order to use this control for a painting of any color, without the need to experimentally identify a priori a constant value for the painting absorption coefficient in the model.

4. Conclusions and perspectives

The experimental model based predictive control of the infrared cure cycle of a powder coating under parameter uncertainty has been tackled. It used a dynamic infinite dimensional model (previously described) aimed at forecasting the temperature during the cure cycle. This partial differential equation model has been approximated in finite dimension to be used in the predictive controller. It has been shown how the absorption coefficient at the surface of the painting sample changes during the cure cycle and affects the radiative behavior of the cure. Experimental closed loop control results of the cure of black and white painting have been shown. According to the results obtained with the black painting, the tuning of the painting absorption coefficient at a constant value in the model, based on off-line open loop experiments with the real painting, is not easy a priori. Indeed, since the infrared flow applied in this model based closed loop control strategy is usually time-dependant, it impacted a lot the value of the real painting absorption coefficient, which in turn introduced a important modeling uncertainty. This on-line uncertainty had less impact for the cure of the white painting, since the best results have been obtained with the white model. Nevertheless, for both paintings, the specified closed loop performances have been relatively well achieved due to the control structure and the controller robustness. In the control point of view, there is therefore no absolute need of sensor and model to evaluate on-line the powder coating spectral reflectance at the top surface and the emitter spectral irradiance.

Perspectives are first dealing with the use of on-line estimations based on a model based observer to improve the accuracy of the control of the cure for a painting of any color: there would be no need to experimentally identify a priori a constant value for the painting absorption coefficient in the model. This observer would be added into the MPC@CB software, such that the on-line estimate of the absorption coefficient would be fed into the controller as a measured disturbance term. It would be also possible with MPC@CB to use the estimate of the temperature and degree of cure profile to better control the final state of cure, by formulating new constraints on the cure cycle based on these parameters. The second step of future works would be to couple in the MPC the model of cure with a model of other interesting end use properties, such that the gloss. An on-line sensor or estimation of the such property would also be required in the feedback nature of the controller. Thirdly, it would be interesting to do the same control study with other emitter types (NIR and SWIR). With this knowledge, it would be possible to optimize the choice of the emitter type based on the entire energy efficiency (from the electrical energy absorbed from the electrical network by the emitter, to the energy absorbed at the surface), combined with the on-line tuning of the infrared flow emitted by the lamps.

References

Abid, K., Dufour, P., Bombard, I., Laurent, P., 2007. Model predictive control of a powder coating curing process: an application of the MPC@CB Software. In: Proceedings of the 26th IEEE Chinese Control Conference (CCC), vol. 2, Zhangjiajie, China, pp. 630–634.

Aggelogiannaki, E., Sarimveis, H., 2008. Non-linear model predictive control for distributed parameter systems using data driven artificial neural network models. Computers and Chemical Engineering 32, 1225–1237.

Baker, J., Christofides, P.D., 2000. Finite-dimensional approximation and control of nonlinear parabolic PDE systems. International Journal of Control 73, 439–456.

Bombard, I., 2007. Contribution à l'étude, au contrôle et à la commande d'un procédé de cuisson radiatif de peintures en poudre. Ph.D. Thesis of the University of Lyon, France.

Bombard, I., Véchot, L., Laurent, P., Lieto, J., 2005. Optimisation de la cuisson sous infrarouge de deux types de peintures en poudre. In: Proceedings of the Congrès Français de Thermique SFT, Reims, France.

Bombard, I., Laurent, P., Jeandel, G., Lieto, J., 2006. A model of the cure of powder coatings based on surface absorptivities in-situ measurements. In: Proceedings of the Future Coat Conference, New Orleans, LA.

Bombard, I., Laurent, P., Lieto, J., Jeandel, G., 2008. A model of the infrared cure of powder coatings based on surface absorptivities in-situ measurements. Journal of Coatings Technology and Research 5 (3), 353–363.

Carr, W.W., Williamson, V.A., McFarland, E.G., Johnson, M.R., 1999. Characterisation infrared absorption by powder coatings on steel panels. Journal of Coatings Technology 71 (889), 71–84.

Chattopadhyay, D.K., Prasad, P.S.R., Sreedhar, B., Raju, K.V.S.N., 2005. The phase mixing of moisture cured polyurethane–urea during cure. Progress in Organic Coatings 54 (4), 296–304.

Christofides, P.D., Daoutidis, P., 1997. Finite-dimensional control of parabolic PDE systems using approximate inertial manifolds. Journal of Mathematical Analysis and Applications 216, 398–420.

Christofides, P.D., El-Farra, N., Li, M., Mhaskar, P., 2008. Model-based control of particulate processes. Chemical Engineering Science 63, 1156–1172.

Clarke, D.W., Mohtadi, C., Tuffs, P.S., 1987aa. Generalized predictive control. Part 1: the basic algorithms. Automatica 23 (2), 137–148.

Clarke, D.W., Mohtadi, C., Tuffs, P.S., 1987bb. Generalized predictive control. Part 2: extensions and interpretations. Automatica 23 (2), 149–160.

Cutler, C.R., Ramaker, B.L., 1980. Dynamic matrix control: a computer control algorithm. In: Proceedings of the Joint Automatic Control Conference, San Francisco, CA.

Cutler, C., Morshedi, A., Haydel, J., 1983. An industrial perspective on advanced control. In: AICHE Annual Meeting, Washington, DC.

Da Silva, B., Dufour, P., Othman, N., Othman, S., 2008. Model predictive control of free surfactant concentration in emulsion polymerization. In: Proceedings of the 17th IFAC World Congress, Seoul, South Korea, Paper 1693, pp. 8375–8380.

Damak, T., 2007. Procedure for asymptotic state and parameter estimation of nonlinear distributed parameter bioreactors. Applied Mathematical Modeling 31, 1293–1307.

Daraoui, N., Dufour, P., Hammouri, H., Hottot, A., 2008. Optimal operation of sublimation time of the freeze drying process by predictive control: application of the MPC@CB Software. In: Proceedings of the 18th European Symposium on Computer Aided Process Engineering (ESCAPE), Lyon, France, pp. 453–458.

De Temmerman, J., 2008. Development of a drying model for the moisture concentration in pasta with control design of the drying air properties. Ph.D. Thesis of the Katholieke Universiteit Leuven, Belgium, ISBN 978-90-8826-057-5.

De Temmerman, J., Dufour, P., Nicolaï, B., Ramon, H., 2009. MPC as control strategy for pasta drying processes. Computers and Chemical Engineering 33 (1), 50–57.

Deans, J., Kögl, M., 2000. The curing of powder coatings using gaseous infrared heaters: an analytical model to assess the process thermal efficiency. International Journal of Thermal Sciences 39, 762–769.

Degnan, T.F., 1982. Temperature gradients in electron beam cured coatings. Radiation Physics and Chemistry 19 (5), 393–401.

Dubljevic, S., Christofides, P.D., 2006. Predictive control of parabolic PDEs with boundary control actuation. Chemical Engineering Science 61, 6239–6248.

Dubljevic, S., El-Farra, N.H., Mhaskar, P., Christofides, P.D., 2006. Predictive control of parabolic PDEs with state and control constraints. International Journal of Robust & Nonlinear Control 16, 749–772.

Dufour, P., Touré, Y., Blanc, D., Laurent, P., 2003. On non-linear distributed parameter model predictive control strategy: on-line calculation time reduction and application to an experimental drying process. Computers and Chemical Engineering 27 (11), 1533–1542.

Dufour, P., Touré, Y., 2004. Multivariable model predictive control of a catalytic reverse flow reactor. Computers and Chemical Engineering 28 (11), 2259–2270.

Edouard, D., Dufour, P., Hammouri, H., 2005. Observer based multivariable control of a catalytic reverse flow reactor: Comparison between LQR and MPC approaches. Computers and Chemical Engineering 29 (4), 851–865.

Flila, S., Dufour, P., Hammouri, H., 2008. Optimal input design for on-line identification: a coupled observer-MPC approach. In: Proceedings of the 17th IFAC World Congress, Seoul, South Korea, Paper 1722, pp. 11457–11462.

Fletcher, R., 1987. Practical Methods of Optimization. Wiley, New York.

Guo, B.-Z., Wang, J.-M., Yang, K.-Y., 2008. Dynamic stabilization of an Euler–Bernoulli beam under boundary control and non-collocated observation. Systems and Control Letters 57 (9), 740–749.

Lee, J.H., Ricker, N.L., 1994. Extended Kalman filter based non-linear model predictive control. Industrial and Engineering Chemistry Research 33 (6), 1530–1541.

Lee, S.S., Han, H.Z.Y., Hilborn, J.G., Månson, J.A.E., 1999. Surface structure build-up in thermosetting powder coatings during curing. Progress in Organic Coatings 36, 79–88.

Li, M., Christofides, P.D., 2008. Optimal control of diffusion–convection–reaction processes using reduced-order models. Computers and Chemical Engineering 32, 2123–2135.

Maidi, A., Diaf, M., Corriou, J.P., 2009. Boundary geometric control of a counter-current heat exchanger. Journal of Process Control 19 (2), 297–313.

Nevistic, V., 1997. Constrained control of non-linear systems. Ph.D. Thesis, ETH-Swiss Federal Institute of Technology, Zürich, Switzerland.

Padhiyar, N., Bhartiya, S., 2009. Profile control in distributed parameter systems using lexicographic optimization based MPC. Journal of Process Control 19 (1), 100–109.

Papini, M., 1996. Study of the radiative properties of powdered and fibrous polymers. Vibrational Spectroscopy 11, 61–68.

Papini, M., 1997. Analysis of the reflectance of polymers in the near- and mid-infrared regions. Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer 57 (2), 265–274.

Perou, A.L., Vergnaud, J.M., 1997. Correlation between the state of cure of a coil coating and its resistance to liquids. Polymer Testing 16 (1), 19–31.

Propoi, A.I., 1963. Use of linear programming methods for synthesizing sampled-data automatic systems. Automatic Remote Control 24 (7), 837–844.

Qin, S.J., Badgwell, T.A., 2003. A survey of industrial model predictive control technology. Control Engineering Practice 11 (7), 733–764.

Ravindran, S.S., 2007. Optimal boundary feedback flow stabilization by model reduction. Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering 196, 2555–2569.

Richalet, J., Rault, A., Testud, J.L., Papon, J., 1978. Model predictive heuristic control: applications to industrial processes. Automatica 14, 413–428.

Salagnac, P., Dutournié, P., Glouannec, P., 2004. Curing of composites by radiation and natural convection in an autoclave. A.I.Ch.E. Journal 50 (12), 3149–3159.

Sesták, J., 1984. Thermophysical Properties of Solids, Their Measurement and Theoretical Analysis. Elsevier, Amsterdam.

Tongsuo, Y., Yang, H., Shujuan, D., Wang, W., Minggui, X., 2002. Infrared reflection of conducting polyaniline polymer coating. Polymer Testing 21, 641–646.

Véchot, L., Bombard, I., Laurent, P., Lieto, J., 2006. Experimental and modeling study of the radiative curing of a polyester-based coating. International Journal of Thermal Sciences 45, 86–93.

Ventura, C., Papini, M., 1999. Analysis of the reflectance of granular materials in the near-infrared wavelength range. Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer 61 (2), 185–195.

Weiss, K.D., 1997. Paint and coatings: a mature industry in transition. Progress in Polymer Science 22 (2), 203–245.

Wood, C., 2007. Is my coating cured? Finishing Today Magazine, February 26–29. 〈http://www.finishingtodaymag.com/CDA/Archives?issue=1860603〉.

Zheng, A., 1997. A computationally efficient non-linear model predictive control algorithm. In: Proceedings of the American Control Conference, Albuquerque, NM.

Zheng, A., 1998. Non linear model predictive control of the Tennessee–Eastman process. In: Proceedings of the American Control Conference, Philadelphia, PA.

Zong, X., 2008. Optimal control of a non-linear parabolic–elliptic system. Non-linear Analysis 70 (6), 2366–2375.

Author's personal copy

Control Engineering Practice 18 (2010) 483–494

Contents lists available at ScienceDirect

Control Engineering Practice

journal homepage: www.elsevier.com/locate/conengprac

Model predictive control during the primary drying stage of lyophilisation

N. Daraoui [a,b], P. Dufour [a,b,*], H. Hammouri [a,b], A. Hottot [a,b]

[a] Université de Lyon, F-69622, France
[b] Université Lyon 1, Villeurbanne, CNRS, UMR 5007, LAGEP, 43 bd du 11 novembre, 69622 Villeurbanne Cedex, France

ARTICLE INFO

Article history:
Received 4 May 2009
Accepted 9 January 2010
Available online 23 February 2010

Keywords:
Process control
Model predictive control
Chemical engineering
Lyophilisation
Drying
Heat and mass transfers

ABSTRACT

During the primary drying stage of pharmaceutical solutions in vial, the sublimation front is the boundary between the dried and frozen layers that moves from the top of the vial to its bottom. While only few on-line measures are available, it is an important variable to control. This paper deals with the on-line partial differential equation model-based predictive control of the sublimation front position, assuming two strategies based on various availability of measurement used in the feedback loop. Through the MPC@CB control software, the robustness of the controller with respect to the main model parameter uncertainty is shown.

© 2010 Elsevier Ltd. All rights reserved.

1. Introduction

Freeze drying, also called lyophilisation, is a drying process used in biotechnology, food and pharmaceutical industries frequently used to stabilize and preserve products (Pikal, 2006). Compared with conventional drying techniques, freeze drying is generally considered to produce the dried product with the highest quality. Until now, a larger use of the freeze drying is limited by its cost and its use remains therefore limited for high value added products, like pharmaceutical products. The main reason for the high cost of freeze drying is the need to operate under a vacuum, which involves an important treatment time. Major costs are due to: the energy for the sublimation of frozen solvent during the primary drying stage, the energy to maintain the vacuum and overhead costs which are all functions of the drying time and the energy for the removal (desorption) of bound (unfrozen) solvent during the primary and secondary drying stages. The sublimation front is the moving boundary between the dried and frozen layers that moves until it reaches the bottom of the sample, hence describing the end of the primary drying stage. At the end of the primary drying stage, the control objectives change to start the secondary drying stage. The control of the sublimation front is therefore important. Moreover, one very important parameter in the study of the freeze drying is the temperature of the product which must be carefully controlled during the primary and the secondary drying stages of freeze drying. In Liapis, Pikal, and Bruttini (1996), the future research needs in freeze drying are identified which emphasis on: pharmaceuticals and biotechnology products formulation, sensing process control during freezing, primary drying stage and secondary drying stage. A primary impediment is that usually very few measurements are available for implementing feedback loop control of such processes. In drying, the issue is that few studies are dealing with process control: this point is summarized in a review paper (Dufour, 2006). Previous studies on the control of the freeze drying process obtained optimal policies offline as a trade off between the productivity of the process and the quality of the product. However, these studies assumed a perfect model with model parameters known perfectly. The contribution of this paper is to provide two implementable model-based control strategies to control the sublimation front position (and hence the duration of drying) on-line during the primary drying stage of the freeze drying process of a solution in vial, in presence of constraints and modeling uncertainties.

To satisfy this objective, the development of a mathematical model is preferable, since it may be used with model-based control strategy to predict the behavior of the freeze drying process. Consequently, a number of mathematical freeze drying models have been published in the literature, mainly in the past twenty years. Generally, dynamic models for freeze-drying predict drying behaviors more accurately than steady state models. These take the form of complex transport equations based on partial differential equations (PDEs), which are difficult to solve online and also need variables and parameters that are difficult to measure accurately experimentally.

Model predictive control (MPC) is one of the most popular finite dimensional controllers (Qin & Badgwell, 2003). Thousands

* Corresponding author. Tel.: +33 4 72 43 18 78; fax: +33 4 72 43 16 99.
E-mail address: dufour@lagep.univ-lyon1.fr (P. Dufour).
URL: http://www.tinyurl.com/dufourpascal (P. Dufour).

0967-0661/$ - see front matter © 2010 Elsevier Ltd. All rights reserved.
doi:10.1016/j.conengprac.2010.01.005

Author's personal copy

Nomenclature for the model

A	Antoine's constant (K)
B	Antoine's constant (−)
c_{p1}	heat capacity of the dried layer (J/kg K)
c_{p2}	heat capacity of the frozen layer (J/kg K)
c_{pg}	specific heat capacity at constant pressure (J/kg)
C_{sw}	concentration of bound water (kg water/kg solid)
$\tilde{C}_{sw}$	concentration of bound water in the new coordinates (kg water/kg solid)
C_{sw}^0	initial concentration of bound water at t=0 (kg water/kg solid)
F_{up}	view factor for radiative heat transfer (−)
H	sublimation front position (m)
h_v	heat transfer coefficient (W/K m^2)
k_1	bulk diffusivity constant (m^2/s)
k_{1e}	thermal conductivity in the dried layer (W/m K)
k_{1e1}	thermal conductivity coefficient in the dried layer (W m/K N)
k_{1e2}	thermal conductivity coefficient in the dried layer (W/m K)
k_2	thermal conductivity in the frozen layer (W/m K)
k_d	desorption rate constant of bound water (s^{-1})
L	length of sample product in vial (m)
M_w	molecular weight of water vapor (kg/mol)
N_w	mass flux of the water vapor (N/m^2/s)
p_0	partial pressure of water vapor at z=0 (N/m^2)
p_H	partial pressure of water vapor at z=H (N/m^2)
$p_{H\infty}$	partial pressure of water vapor coefficient (N/m^2)
q_1	heat flux at the top of the dried layer at z=0 (W/m^2)
q_2	heat flux at the bottom of the frozen layer at z=L (W/m^2)
R_{ig}	ideal gas constant (N m/K mol)
$SFMV$	sublimation front mean velocity (m/min)
t	time (s)
t_{final}	final time at the end of the simulation (s)
T^0	initial product temperature at t=0 (K)
T_{lp}	temperature of lower heating plate (K)
T_{up}	temperature of the upper heating plate (K)
T_1	temperature in the dried layer (K)
$\tilde{T}_1$	temperature in the dried layer in the new coordinates (K)
T_2	temperature in the frozen layer (K)
$\tilde{T}_2$	temperature in the dried layer in the new coordinates (K)
T_g	glass transition temperature (K)
$T_{\min}$	minimum temperature allowed in the chamber (K)
$T_{\max}$	maximum temperature allowed in the chamber (K)
z	space variable (m)
ΔH_s	enthalpy of sublimation of ice (J/kg)
ΔH_v	enthalpy of vaporization of bound water (J/kg)
ρ_1	density in the dried layer (kg/m^3)
ρ_{1e}	effective density in the dried layer (kg/m^3)
ρ_2	density in the frozen layer (kg/m^3)
σ	Stefan Boltzman constant (W/K^4 m^2)
ξ_1	normalized space variable in the dried layer (−)
ξ_2	normalized space variable in the frozen layer (−)

Nomenclature for the control approach

d	unconstrained manipulated variable
d_0	unconstrained manipulated variable for S_0
Δd	unconstrained manipulated variable for S_{TVL}
e	output error
F_b, F_d	nonlinear operators
g_i	output constraints
h_1, h_2	functions
j	discrete time index in the future
k	actual discrete time index
J	cost function
J_{ext}	exterior penalty function
J_{tot}	total penalized cost function
l	iteration index in the algorithm
n	number of output constraints
N_k	number of time samples considered
N_p	prediction horizon (−)
$NRMSET$	normalized root mean square error for tracking (%)
$NRMSD$	normalized root mean square difference (%)
S_{NL}	non-linear model
S_0	non-linear model computed off-line
S_{TVL}	time-varying linearized model computed on-line
t	time (s)
Te	sampling time (s)
u	manipulated variable
$\Delta u_{\min}$	minimum variation allowed for the manipulated variable during one sample time
$\Delta u_{\max}$	maximum variation allowed for the manipulated variable during one sample time
$u_{\min}$	minimum magnitude allowed for the manipulated variable
$u_{\max}$	maximum magnitude allowed for the manipulated variable
u_0	manipulated variable for S_0
Δu	manipulated variable for S_{TVL}
w_i	penalty weight
x_m	model state
x_m^0	initial condition for the model state at t=0
Δx_m	model state for S_{TVL}
y_m	model output
y_0	model output for S_0
Δy_m	model output for S_{TVL}
y_p	process output
y_{ref}	reference behavior
$\nabla.$	gradient operator
$\nabla^2.$	Hessian operator
λ	control algorithm parameter
$\partial\Omega$	boundary of the spatial domain
Ω	spatial domain
ζ	space variable (m)

of industrial applications of MPC exist today, particularly in the chemical and petrochemical industries. The idea of MPC is to solve an on-line open-loop model-based optimization problem over a finite prediction horizon in order to find the value of the manipulated variable that has to be implemented. The procedure is repeated at each sample time with the model being updated with process measurements. The first main advantage is that constraints, due to manipulated variables physical limitations, operating procedures or safety reasons, etc., may be explicitly specified into the problem formulation. The second main advantage of MPC is its ability to address long time delays, inverse responses, significant non-linearities and multivariable interactions. However, a numerical technique must be used to solve this optimal problem, where the on-line computational effort may become a limiting factor in their implementation. Therefore, significant effort is being devoted towards

Author's personal copy

development of fast MPC techniques (Diehl et al., 2002; Mahmood & Mhaskar, 2008; Schäfer, Kühl, Diehl, Schlöder, & Bock, 2007; Zavala & Biegler, 2009) even for large-scale systems. The method used here (Dufour, Touré, Blanc, & Laurent, 2003) is developed for problems where the time needed to compute the solution of the model (which is based on PDEs) may be important (with respect to the relatively short sampling time) and where few iterations are allowed for the optimizer to give a solution. Therefore, the main idea of this method is that the model is solved rapidly and the input (hard) constraints are satisfied at any time, in order to be physically applicable. Moreover, due to the short time available, since the output (soft) constraints may not all be satisfied at any time, the smallest constraint violation can be found. Before any future experimental implementation of the proposed approach, the first step is therefore to evaluate, with simulations, the closed loop performance of the MPC controller and is the focus of this paper.

This paper is organized as follows: First, the non-linear parabolic PDE model describing the primary drying stage of the freeze drying process is presented. Then the general framework of the model predictive control approach is developed. Finally, this MPC approach is evaluated for the control of the freeze drying process. In order to control the sublimation front position, two closed loop control problems are presented here, assuming various availability of measurement used in the feedback loop: First, a temperature trajectory tracking (measured at the bottom of the sample) is used for inferential control (Doyle III, 1998) of the sublimation front position. Secondly, the maximization of the constrained sublimation front velocity is implemented assuming the availability of the on-line measure of the sublimation front position. The simulations are implemented using the MPC@CB software.

2. Freeze drying process modeling

Freeze-drying is a drying process where the solution is first frozen at low temperature, thereby converting most of the water into ice. Unfrozen water remains in the freeze concentrated phase which must be maintained under its glass transition temperature T_g. The ice is then removed by sublimation at low temperature and at low pressure during the primary drying stage of the process. This gives an opportunity to avoid denaturation of the product caused by heating at low temperature. In the pharmaceutical industry, the solution is normally filled into glass vials which are placed on temperature controlled shelves in a large vacuum chamber. The shelf temperature is lowered to freeze the product. After complete solidification, the pressure in the chamber is lowered to initiate rapid sublimation. Sublimation begins at the top of the material and creates the interface between the frozen and dried layers. This interface moves through the material until only a dried porous material remains at the end of the primary drying stage. In general, the upper surface heat input of the dried layer is supplied by radiation from the top of the sample through the gas phase. This heat is transferred by conduction to the sublimation interface through the porous dried layer. The bottom surface heat input of the frozen layer is supplied by the heating plate and is transferred by conduction to the sublimation interface through the frozen layer of the sample. Freeze drying involves simultaneous heat and mass transfers which have to be taken into account when models are developed.

2.1. Existing models

Models for prediction of freeze-drying are based on complex transport equations, which are difficult to solve and based on variables and parameters difficult to measure accurately experimentally. A number of freeze-drying models have been published in the literature, first as steady state models (like the uniformly retreating ice front (URIF) model of King, 1971), and later featuring dynamics characteristics. A brief summary of these models follows:

- In Liapis and Litchfield (1979a), one dimensional heat and mass transfer was assumed, the temperature and pressure profiles inside the dried and frozen regions were modeled using PDEs, which in turn, allowed modeling of the sublimation front position.
- In Liapis and Litchfield (1979b), a PDE model was based on material and energy balances in the dried and frozen regions of a material under freeze drying. Both sublimation and adsorption of unfrozen water were accounted for.
- In Liapis and Bruttini (1994), a PDE model-based theory was given to describe quantitatively the dynamic behavior of the primary and secondary drying stages of the freeze-drying of pharmaceutical crystalline and amorphous solutes.
- According to the previous PDE model of Liapis and Bruttini (1994), and Sadikoglu and Liapis (1997) showed that the contribution of removal of bound water was not significant for skim milk.
- In Mascarenhas, Akay, and Pikal (1997), both the primary and secondary drying stages were modeled in two spatial dimensions using a finite element formulation. The time-wise variation and spatial profiles of the partial pressure of water vapor, the temperature, the concentration of sorbed water and the position of the sublimation front were modeled.
- Delgado and Sun (2001) presented a review on freeze drying, where it was underlined that heat transfer coefficients were hard to estimate with typical uncertainties of $\pm 20\%$ and that data on mass transfer coefficients were scarce.
- Brülls and Rasmuson (2002) showed an experimental and theoretical heat transfer study on the freezing of liquid solutions in commercial glass vials for industrial operating conditions. A dynamic two spatial dimensions PDE model based on Fourier's law allowed investigating the effects of different factors (vial type and shape, curvature of the vial bottom, total chamber pressure, filling height, and vial position on the shelf).
- In Boss, Filho, and Vasco de Toledo (2004), the proposed mathematical model better described the real data compared to the model of Sadikoglu and Liapis (1997). Influence of the value of certain model parameter over freeze drying was shown.
- In Hottot, Peczalski, Vessot, and Andrieu (2006), a two spatial dimension PDE model simulated the temperature profiles and the sublimation front velocities during the sublimation step of the freeze drying of Bovin Serum Albumin (BSA)-based formulations for typical industrial freeze-drying conditions. This finite element code was also used in Nakagawa, Hottot, Vessot, and Andrieu (2007) to estimate the ice crystal size distribution.
- In Sane and Hsu (2008), a coupled PDE and ordinary differential equation (ODE) model predicted the product temperature profiles during primary and secondary drying stages, and chamber pressure, condenser temperature and nitrogen flow rate.
- In Liu, Zhao, and Feng (2008), a set of exergy analysis model was established to investigate exergy losses in a freeze-drying cycle.

The works of Liapis' team in the late seventies was therefore the beginning of the modeling in lyophilisation and it influenced the next generations of model.

Author's personal copy

2.2. Mathematic model

To carry out the objective of this paper, a one spatial dimension freeze drying model based on the work of Sadikoglu and Liapis (1997) for a standard simplified formulation is considered. BSA is used because of its stability, its lack of effect in many biochemical reactions, and its low cost since large quantities may be obtained. The freeze drying process during the primary drying stage is illustrated in Fig. 1. During the primary drying stage, the product is composed of two phases: a dry layer (index 1 in the model), in which the majority of water is sublimated and a frozen layer (index 2 in the model). These two areas are separated by a moving interface called the sublimation ice front described by the space coordinate z at $z=H(t)$. The quantities q_1 and q_2 shown in Fig. 1 represent the heat flux at the top and the bottom of the vial, respectively, including the effects of radiation and conduction.

In order to decrease the on-line computational load for the model-based control algorithm, it is assumed:

- One dimensional heat and mass transfers across z.
- The sublimation front is planar and parallel to the horizontal section of the vial.
- The gas phase inside the pores of the dry layer is only composed of pure water vapor: the effect of inert gas is negligible because the amount of inert gas in the drying chamber is much smaller than the water vapor.
- The value of the partial pressure of water vapor at the top of the dry layer is equal to the total pressure in the sublimation chamber.

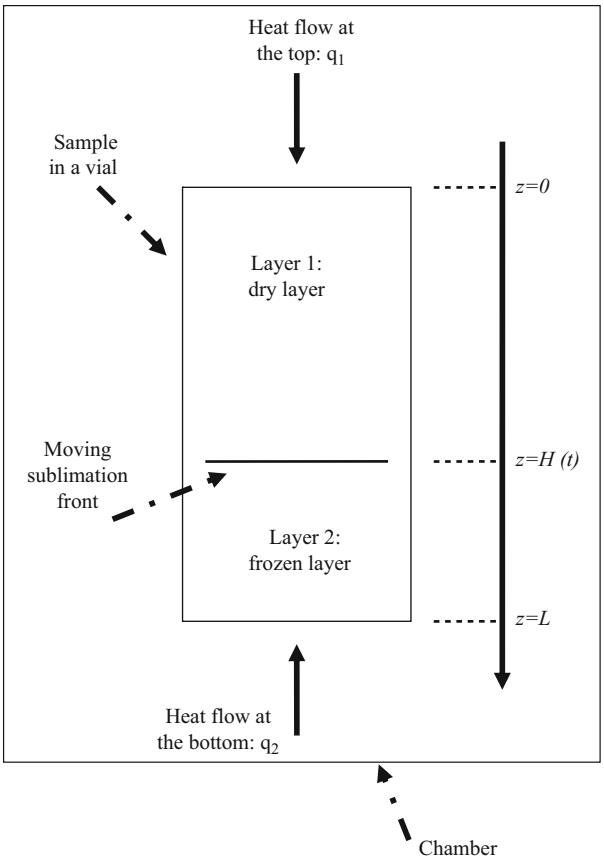

Fig. 1. A schematic of the freeze drying process during the primary drying stage.

- The frozen region is considered to be homogeneous with uniform thermal conductivity, density and specific heat.
- Desorption of the sorbed water in the dried layer may occur during the primary drying stage.
- Side wall heat flux is negligible.

Based on these assumptions, the mathematical model consists of the unsteady state energy balance in the dried and frozen regions:

$$\begin{cases} \dfrac{\partial T_1(z,t)}{\partial t} = \dfrac{k_{1e}(T_1(H,t),t)}{\rho_{1e}c_{p1}}\dfrac{\partial^2 T_1(z,t)}{\partial z^2} - \dfrac{c_{pg}}{\rho_{1e}c_{p1}}\dfrac{\partial(N_w(T_1(H,t),H(t))T_1(z,t))}{\partial z} \\ \qquad -\dfrac{\Delta H_v \rho_1}{\rho_{1e}c_{p1}}k_d C_{sw}(z,t), \quad 0<z<H(t), \ t>0 \\ \dfrac{\partial T_2(z,t)}{\partial t} = \dfrac{k_2}{\rho_2 c_{p2}}\dfrac{\partial^2 T_2(z,t)}{\partial z^2}, \quad H(t)<z<L, \ t>0 \\ \dfrac{dH(t)}{dt} = -\dfrac{1}{\rho_2-\rho_1}N_w(T_1(H,t), \quad H(t)), \ t>0 \\ \dfrac{\partial C_{sw}(z,t)}{\partial t} = -k_d C_{sw}(z,t), \quad 0\le z\le H(t), \ t>0 \end{cases} \tag{1}$$

where the two independent variables are the time t and the space z. L is the length of the sample. The state variable $x(z,t)$ is constituted by: the dried layer temperature $T_1(z,t)$, the frozen layer temperature $T_2(z,t)$, the sublimation front position $H(t)$, and the concentration of bound water $C_{sw}(t)$. The model parameters which do not depend on t or $\boldsymbol{z}$ are constant values. The value used for the model parameters may be found in Hottot, Daoussi, and Andrieu (2006) and are summarized in the nomenclature with the model variables.

In order to specify the remaining functions in this model, let us first define p_0 and $p_H(T_1(H,t))$, the partial pressures of water vapor at $z=0$ and $H(t)$, respectively. The pressure boundary condition at the top surface of the material being dried (p_0) is defined as a constant pressure inside the drying chamber, and the vapor pressure at the sublimation interface ($p_H(T_1(H,t))$) is defined as an equilibrium vapor pressure according to the temperature at the moving interface. The pressure $p_H(T_1(H,t))$ is given by (Chouvenc, Vessot, Andrieu, & Vacus, 2004):

$$\begin{cases} p_H(T_1(H(t),t)) = p_{H\infty}\exp\left(-\dfrac{A}{T_1(H(t),t)}\right), \quad t>0 \\ p_{H\infty} = \exp(B) \end{cases} \tag{2}$$

Based on the diffusion equations by Evans, a simplified version of the water vapor mass flux $N_w(T_1(H,t), H(t))$, used in the model (1) and defined in Liapis and Litchfield (1979a), is

$$N_w(T_1(H,t),H(t)) = -\frac{M_w k_1}{R_{ig}T_1(H(t),t)H(t)}(p_H(T_1(H(t),t))-p_0), \quad t>0 \tag{3}$$

The partial pressure of water vapor at $z=0$ (p_0) may also be used as a manipulated variable. Here a constant value is assigned to this pressure ($10\,\mathrm{N/m^2}$). The thermal conductivity in the dried layer $k_{1e}(T_1(H,t))$ is given by the following expression (Sheehan & Liapis, 1998):

$$k_{1e}(T_1(H(t),t)) = k_{1e1} * (p_0 + p_H(T_1(H(t),t))) + k_{1e2}, \quad t>0 \tag{4}$$

The initial conditions for the equations in the dynamic system (1) are given by

$$\begin{cases} T_1(z,t) = T^0, \quad 0\le z\le H(t), \ t=0 \\ T_2(z,t) = T^0, \quad H(t)\le z\le L, \ t=0 \\ H(t) = 0^+, \quad t=0 \\ C_{sw}(z,t) = C_{sw}^0, \quad 0\le z\le L, \ t=0 \end{cases} \tag{5}$$

Author's personal copy

The boundary conditions for the system (1)–(4) are as follows:

$$\begin{cases} -k_{1e}(T_1(H(t),t))\dfrac{\partial T_1(z,t)}{\partial z} = q_1(t) = \sigma F_{up}(T_{up}^4(t) - T_1^4(0,t)), \quad z=0, \quad t>0 \\ k_2\dfrac{\partial T_2(z,t)}{\partial z} - k_{1e}(T_1(z,t))\dfrac{\partial T_1(z,t)}{\partial z} \\ \quad = \left(-\Delta H_s - \dfrac{\rho_2 c_{p2} T_2(z,t) - \rho_1 c_{p1} T_1(z,t)}{\rho_2 - \rho_1}\right) N_w(T_1(z,t), H(t)), \quad z = H(t), \quad t>0 \\ T_1(z,t) = T_2(z,t), \quad z = H(t), \quad t>0 \\ k_2\dfrac{\partial T_2(z,t)}{\partial z} = q_2(t) = -h_v(T_{lp}(t) - T_2(L,t)), \quad z = L, \quad t>0 \end{cases} \tag{6}$$

where $T_{up}(t)$ and $T_{lp}(t)$ are the temperatures of the lower and upper heating plates, respectively, that are used in this study as manipulated variables.

Assumption 1. The temperature of the upper and lower heating plates are the same, i.e. $T_{up}(t)$=$T_{lp}(t)$.

Based on Assumption 1, the manipulated variable u is T_{up} and the state variable x is $(T_1\ T_2\ H\ C_{sw})^T$.

Freeze drying constitutes, therefore, a typical moving boundary problem: the motion of the sublimation interface is essential for accurate prediction of the freeze drying characteristics. In order to be used in the model-based control software, the equations of the model must first be expressed in a new coordinates system (Duda, Malone, Notter & Vrentas, 1975):

$$\begin{cases} \xi_1 = \dfrac{z}{H(t)}, \quad 0 < z \le H(t), \quad t \ge 0 \\ \xi_2 = \dfrac{H(t)-z}{H(t)-L}, \quad H(t) \le z \le L, \quad t>0 \end{cases} \tag{7}$$

Let us define new state variables as follows:

$$\begin{cases} \tilde{T}_1(\xi_1,t) = T_1(z,t) \\ \tilde{T}_2(\zeta_2,t) = T_2(z,t) \\ \tilde{C}_{sw}(\xi_1,t) = C_{sw}(z,t) \end{cases} \tag{8}$$

Therefore, the dynamic equations of the initial model (1)–(4) can be written as follows:

$$\begin{cases} \dfrac{\partial \tilde{T}_1(\xi_1,t)}{\partial t} = \dfrac{k_{1e}(\tilde{T}_1(z,t))}{\rho_{1e}c_{p1}} \dfrac{1}{H^2(t)} \dfrac{\partial^2 \tilde{T}_1(\xi_1,t)}{\partial \xi_1^2} + \left(\xi_1 + \dfrac{c_{pg}}{\rho_{1e}c_{p1}}(\rho_2 - \rho_1)\right) \\ \quad \times \dfrac{1}{H(t)} \dfrac{dH(t)}{dt} \dfrac{\partial \tilde{T}_1(\xi_1,t)}{\partial \xi_1} - \dfrac{\Delta H_v \rho_1}{\rho_{1e}c_{p1}} k_d \tilde{C}_{sw}(\xi_1,t), \quad 0<\xi_1<1, \quad t>0 \\ \dfrac{\partial \tilde{T}_2(\xi_2,t)}{\partial t} = \dfrac{\alpha_2}{(H(t)-L)^2} \dfrac{\partial^2 \tilde{T}_2(\xi_2,t)}{\partial \xi_2^2} + \dfrac{(\xi_2-1)}{(H(t)-L)} \dfrac{dH(t)}{dt} \dfrac{\partial \tilde{T}_2(\xi_2,t)}{\partial \xi_2}, \\ \qquad\qquad 0<\xi_2<1, \quad t>0 \\ \dfrac{dH(t)}{dt} = -\dfrac{N_w(\tilde{T}_1(\xi_1,t),H(t))}{(\rho_2-\rho_1)}, \quad t>0 \\ \dfrac{\partial \tilde{C}_{sw}(\xi_1,t)}{\partial t} = -k_d \tilde{C}_{sw}(\xi_1,t), \quad 0 \le \xi_1 \le 1, \quad t>0 \end{cases} \tag{9}$$

The initial conditions (5) become

$$\begin{cases} \tilde{T}_1(\xi_1,t) = T^o, \quad 0 \le \xi_1 \le 1, \quad t=0 \\ \tilde{T}_2(\xi_2,t) = T^o, \quad 0 \le \xi_2 \le 1, \quad t=0 \\ H(t) = 0^+, \quad t=0 \\ \tilde{C}_{sw}(\xi_1,t) = C_{sw}^0, \quad 0 \le \xi_1 \le 1, \quad t=0 \end{cases} \tag{10}$$

The boundary conditions (6) become

$$\begin{cases} -\dfrac{k_{1e}(\tilde{T}_1(\xi_1,t)}{H(t)} \dfrac{\partial \tilde{T}_1(\xi_1,t)}{\partial \xi_1} = \sigma F_{up}(T_{up}^4(t) - \tilde{T}_1^4(0,t)) \quad \xi_1 = 0, \quad t>0 \\ \dfrac{k_2}{(H(t)-L)} \dfrac{\partial \tilde{T}_2(\xi_2,t)}{\partial \xi_2} - \dfrac{k_{1e}(\tilde{T}_1(\xi_1,t)}{H(t)} \dfrac{\partial \tilde{T}_1(\xi_1,t)}{\partial \xi_1} \\ \quad = \left(-\Delta H_s - \dfrac{\rho_2 c_{p2} \tilde{T}_2(\xi_2,t) - \rho_1 c_{p1} \tilde{T}_1(\xi_1,t)}{\rho_2 - \rho_1}\right) N_w(\tilde{T}_1(\xi_1,t), H(t)), \\ \qquad\qquad \xi_1 = 1, \quad \xi_2 = 0, \quad t>0 \\ \tilde{T}_1(\xi_1,t) = \tilde{T}_2(\xi_2,t), \quad \xi_1 = 1, \quad \xi_2 = 0, \quad t>0 \\ -\dfrac{k_2}{(H(t)-L)} \dfrac{\partial \tilde{T}_2(\xi_2,t)}{\partial \xi_2} = -h_v(T_{lp}(t) - \tilde{T}_2(L,t)), \quad \xi_2 = 1, \quad t>0 \end{cases} \tag{11}$$

One can clearly note that the model (9–11) represents a strong non-linear formulation described by a one-dimensional PDE model. Also, the effect of the moving boundary on the dynamics of both the temperatures is clearly underlined since a non-linear convective term now appears. This model belongs to a more general class of one dimensional non-linear parabolic PDE based model with boundary control, whose class is summarized as follows:

$$(S_{NL}) \begin{cases} \dfrac{\partial x_m(\zeta,t)}{\partial t} = F_d(x_m(\zeta,t)), \quad \forall \zeta \in \Omega, \quad t>0 \\ F_b(x_m(\zeta,t), u(t)) = 0, \quad \forall \zeta \in \partial\Omega, \quad t>0 \\ x_m(\zeta,0) = x_m^0, \quad \forall \zeta \in \Omega \cup \partial\Omega, \quad t=0 \\ y_m(t) = Cx_m(\zeta,t), \quad \forall \zeta \in \Omega \cup \partial\Omega, \quad t>0 \end{cases} \tag{12}$$

where ζ is the independent space variable, Ω is the spatial domain, $\partial\Omega$ is its boundary and t is the independent time variable. x_m is the model state belonging to an adequate infinite dimensional state space, u is the control signal (or manipulated variable), y_m is the model output, F_d and F_b are non-linear operators and C is a linear operator.

Assumption 2. The solution of (S_{NL}) is unique and depends continuously on its initial value.

In terms of parameter uncertainty, Hottot, Daoussi et al. (2006) showed that the heat capacity of the frozen layer C_{p2} was not known accurately and changed according to the manipulated temperature variable: between 240 and 260 K, it varied up to 50% around a nominal value. Moreover, it had a large impact over the state variable dynamics. This motivates the use of a closed loop controller for such process, which is discussed in Section 4.

3. Freeze drying process control strategy

3.1. Existing control approaches

In terms of tuning of the control variables, suitable shelf temperature and chamber pressure conditions are frequently established empirically off-line in a "trial-and-error" experimental approach or by factorial design. Some freeze-drying control studies were published:

- Meo III and Friedly (1973) seems to be the first work dealing with the control of freeze dryer. The control approach was not discussed but allows decreasing the drying time.
- In Liapis and Litchfield (1979a), a quasi steady state model was used in a Lagrangian approximation to decrease the drying time. The control policies consisted of four segments where each of the two manipulated variables were constant and were tuned off-line to prevent the surface and interface temperatures from exceeding their maximum allowable. This was later extended to the dynamic model case in Litchfield and Liapis (1982).

Author's personal copy

- In Lombraña and Díaz (1987a), a quasi-steady PDE model was used, where the mass transfer coefficient in the dried region was assumed to vary according to experimental knowledge. The control variable was the plate temperature and was tuned according to a programmed heating strategy which accounted for the constraints on the temperature. The control law was not detailed. Compared with the constant heating strategy, this strategy allowed decreasing the drying time. In the multivariable control case (adding the pressure as control variable), the drying time was shorter (Lombraña & Díaz, 1987b).
- In Lombraña and Villarán (1997), the optimal open loop temperature and pressure profiles in the fluid bed were obtained by a short factorial design.
- In Sadikoglu, Liapis, and Crosser (1998), a lagrangian method was used to find the optimal control of the primary and secondary drying stages, assuming a perfect PDE model. In Sadikoglu, Ozdemir, and Seker (2003), this approach was used with a two spatial dimension PDE model for the optimal control of the primary drying stage.
- In Boss et al. (2004), compared to a drying with constant control values, an open loop model-based optimization strategy (using sequential quadratic programming) allowed to decrease the primary and secondary drying times by 1.5 h, while removing the same amount of bound water.
- In Tang, Nail, and Pikal (2005), for primary and secondary drying stages, a procedure to optimize the freeze-drying process was developed by combination of feedback information from temperature measurement during lyophilisation, expert system and steady state heat and mass transfer theory.
- In Barresi et al. (2009), a software was developed for determining the optimal shelf temperature for primary drying of the lyophilisation process of pharmaceuticals in vials, ensuring the fastest drying time without overcoming the maximum allowable product temperature both in scouting and production cycles. It was based on a relatively simple model.
- In Fissore, Velardi, and Barresi (2008), two approaches were discussed. Firstly, an ideal model-based control strategy continuously changed the shelf temperature in order to maintain the product temperature at a safe level, while minimizing the drying time. Then, a more realistic approach was presented in which an adaptive PI controller with optimal on-line tuning was based on the feedback obtained by an observer of the maximum product temperature.

Recently, the Ph.D. thesis work of Velardi (2004) dealt with mathematical modeling, observer design and control in lyophilisation. These models (Velardi & Barresi, 2008) could be used for off-line optimization of the freeze drying cycle, as well as for on-line purposes such as process monitoring. This led to the design of a PI controller with adaptive, model-based tuning of the P and I modes that also utilized observer techniques for the feedback data (Velardi, Hammouri, & Barresi, 2005).

Another issue in lyophilisation deals with the lack of in situ sensors required by a closed loop controller: indeed, it is often not possible to have a physical sensor embedded in the sample. Most of the time, only pressure and temperature measurements are available at certain points. Therefore, some recent works are focusing on the development of sensors. Hottot, Andrieu, Shalaev, Gatlin, and Ricketts (2009) and Hottot, Andrieu, Hoang et al. (2009) compared the use of physical sensors (hygrometer, pressure gauge, thermocouples, etc.) on a syringe rack. Another idea was use of model-based sensors (Besançon, 2007), also known as observers. Velardi et al. (2005), Velardi, Hammouri, and Barresi (2009) and (Barresi et al., 2009) dealt with observer based techniques that allowed estimating temperature and interface position online.

In this work, the use of a closed loop model-based control approach is advocated, since it allows handling model parameter uncertainties. A PDE model is used in a predictive controller to tune online the shelve temperatures according to the control objective and the various measurements that are assumed available.

3.2. Control of PDE systems

The majority of control applications focus on processes whose dynamic behavior may be modeled by relatively simple models usually consisting of ODEs. However, most chemical systems, like the freeze drying process, are characterized by non-linear distributed parameter systems which are naturally modeled by non-linear PDEs. In control theory, due to the complexity of the problem, relatively few studies are devoted to the control of processes explicitly characterized by PDE models, especially in the non-linear case. The more popular way to synthesize finite dimensional controllers for infinite dimensional systems is to first construct a finite approximation of the model which serves as the foundation for the finite dimensional controller. Even if various finite dimensional methods are proposed to control such distributed parameter systems, there is no general framework yet. The original PDE model is usually simplified into an ODE model based on: finite differences method, finite volume method, orthogonal collocation method, Galerkin's method, or on modal decomposition. Many works exist with these approximation techniques. Recently Dubljevic, Mhaskar, El-Farra, and Christofides (2005) used Galerkin's method to capture the dominant dynamics of the (PDE based) transport-reaction processes in order to design a MPC. In Dubljevic and Christofides (2006), a modal decomposition technique was used to decompose the system into a finite dimensional (slow) subsystem coupled with an infinite dimensional (fast) subsystem. Various state feedback predictive controllers were then designed. In Damak (2007), the design of an asymptotic estimator of state and time-varying parameters in the case of a non-linear distributed parameter bioreactor was presented. The structure of the estimator was based on an approximated model of the bioreactor behavior using orthogonal collocation. In Ravindran (2007), the optimal boundary feedback stabilization of Navier–Stokes equations using model reduction was presented. The model reduction was carried out using a combination of proper orthogonal decomposition (POD) and Galerkin projection, and used for the optimal linear quadratic regulator (LQR) synthesis. In Li and Christofides (2008), two computationally efficient approaches were presented for the optimal control of diffusion–convection reaction processes described by parabolic PDEs subject to Danckwerts boundary conditions. It was based on reduced-order models combined with a LQR. In Christofides, El-Farra, Li, and Mhaskar (2008), an overview of recently developed control methods for PDE based models was presented, with examples on crystallization, aerosol and thermal spray. In Maidi, Diaf, and Corriou (2009), a PDE model combined with differential geometry has been applied to compare two boundary control strategies for the temperature of the liquid fluid at the outlet of a heat exchanger. In Padhiyar and Bhartiya (2009), the control of the spatial property profile was discussed, since the endpoint itself is a manifestation of the reaction path and a particular path adopted may offer advantages over others. Based on a MPC formulation, a lexicographic optimization was used to prioritize the different sections of the profile when the target profile specified was unachievable. Cascaded continuous stirred tank reactors were used to approximate the model of a pulp digester.

Author's personal copy

3.3. Model predictive control approach employed

A particular PDE model-based predictive control strategy detailed in Dufour et al. (2003) is used here. The idea of this approach is to transform the initial PDE model-based constrained control problem into an ODE model-based unconstrained control problem, such that the time needed to solve the on-line optimization problem is less than the sampling time. Therefore, such a controller may be implemented for the online control of a real plant. The drawback of this approach is that it requires several approximations, both in the resolution method and in the model (which is solved in an open loop sense) by the MPC that may impact the closed loop performance. In the pasta dryer control (De Temmerman, Dufour, Nicolaï, & Ramon, 2009), using such a linearized model based strategy instead of a non-linear model based strategy contributed to a significant reduction in the online computational time needed by the MPC (by a factor of 5), without compromising the closed loop performance. In this approach, the initial general optimization problem is formulated into the future over a receding horizon N_p, where the cost function J aims to reflect any control problem (trajectory tracking, processing time minimization, energy consumption minimization, etc.):

$$\min_u J(u) = \sum_{j=k+1}^{j=k+N_p} h_1(y_{ref}(j), e(k), y_m(j), u(j)) \tag{13}$$

where k is the actual discrete time ($t=k*Te$), Te is the sampling time, j is the future discrete time index. y_p is the process controlled output that has to follow as best as possible the prescribed reference $y_{ref.}$ The internal model closed loop control structure is used, where the control u is applied on both the process and the model, and where the feedback term for the model update is

$$e(k) = y_p(k) - y_m(k), \quad \forall k > 0 \tag{14}$$

Assumption 3. In order to forecast the process output y_p into the future j, it is assumed that the error $e(j)=y_p(j)-y_m(j)$ is constant into the future: $e(j)=e(k)$ is obtained after each update of the measure at time k.

$$y_p(j) = y_m(j) + e(k), \quad \forall k > 0, \ \forall j \in [k+1, k+N_p] \tag{15}$$

The n general output constraints g_i related to operating conditions, safety, quality, are formulated as inequality constraints on the measured or estimated output (and the input if needed). Based on Assumption 3 and on the internal model control closed loop structure, the n general output constraints g_i are reformulated, based on the feedback term $e(k)$ and model response in the future $y_m(j)$ obtained with the model:

$$g_i(e(k), y_m(j), u(j)) \le 0, \quad \forall k > 0, \ \forall j \in [k+1, k+N_p], \ \forall j \in I^n = \{1, \ldots, n\} \tag{16}$$

These output constraints g_i are handled in the optimization problem through the penalty term $J_{ext,}$ based on the exterior penalty method (Fletcher, 1987):

$$J_{ext}(u) = \sum_{j=k+1}^{j=k+N_p} \left(\sum_{i=1}^{i=n} (w_i \max^2(0, g_i(e(k), \ y_m(j), u(j)))) \right) \tag{17}$$

where w_i is an adaptive positive defined weight. The advantage is that such an approach can handle cases where one (or more) of the output constraints may not be satisfied by minimizing the constraint violation. The cost function J and the penalty term J_{ext} are then combined into J_{tot}:

$$\min_u \quad J_{tot}(u) = J(u) + J_{ext}(u) \tag{18}$$

Concerning the constraints on the manipulated variable u of the process (the constrained optimization argument in the optimization task), they are stated as:

$$\begin{cases} u_{\min} \le u(k) \le u_{\max}, & \forall k > 0 \\ \Delta u_{\min} \le u(k) - u(k-1) \le \Delta u_{\max}, & \forall k > 1 \end{cases} \tag{19}$$

In order to decrease the computational load, u is assumed to be a scalar (i.e. a step function over the receding horizon N_p): therefore, the number of arguments of the optimization problem is reduced to one. This constrained optimization argument u is transformed into the unconstrained optimization argument d through a simple hyperbolic transformation of the magnitude and velocity constraints specified for the manipulated variable u (Dufour et al., 2003). This transformation is parameterized at k by the past data $u(k-1)$ and the specified constraint bounds of (19). The optimizer argument d is finally used in an online penalized unconstrained optimization problem:

$$\min_u J_{tot}(d) = J(h_1(y_{ref}(j), e(k), y_m(j), d(j))) + J_{ext}(g_i(e(k), y_m(j), d(j))) \tag{20}$$

Widely known and used for its robustness and convergence properties, Levenberg–Marquardt's algorithm is used here and the optimization argument is determined iteratively at each sample time k using the process measurement (or estimation), the model predictions and the cost function J_{tot}. From a practical point of view, the next step in this problem is to reduce the computational time needed to solve the optimization problem during the sampling period. This is achieved in several steps. First, the time needed to solve the non-linear model may be greatly reduced when it is linearized first in some manner and then the techniques developed for linear systems are employed online subsequently. Based on Dufour et al. (2003), the non-linear PDE model (S_{NL}) is first formulated offline for a particular tuning of $u=u_0$, which leads to the linearization trajectories x_0 and y_0 described by (S_0). Then, around these trajectories, small variations of the state Δx_m and small variations of the model output Δy_m are connected to the small variations of the control actions Δu through a time varying linearized PDE model (S_{TVL}). Finally, the offline non-linear PDE model (S_0) and the online time varying linearized PDE model (S_{TVL}) replace the initial online non-linear PDE model (S_{NL}). More technical details may be found in Dufour et al. (2003). One practical question deals with the choice of the linearization trajectory (hence the tuning of u_0). It may be obtained as the optimal solution of the control problem, assuming a perfect model (Dufour, Touré, Michaud, & Dhurjati, 2004). It may also be obtained with a simple tuning of the control actions (constant values for example), by trial-error with simulation, based on the minimization of the cost function (20). Secondly, in order to be able to calculate y_m into the future as required by the cost function (20), these PDE models are approximated in finite dimension by a discretization technique (finite difference approach). The initial PDE model-based constrained problem is therefore transformed into an ODE model-based unconstrained penalized problem, where the final internal model structure with MPC (IMC-MPC) is shown in Fig. 2.

The control objective is then to find online the variation Δd (hence Δu) of the variable d (hence the manipulated variable u) about a well chosen trajectory d_0 (hence u_0) that improves at each sample time the online optimization result, based on the model response Δy_m. The final unconstrained penalized control problem that should be solved at each discrete

Author's personal copy

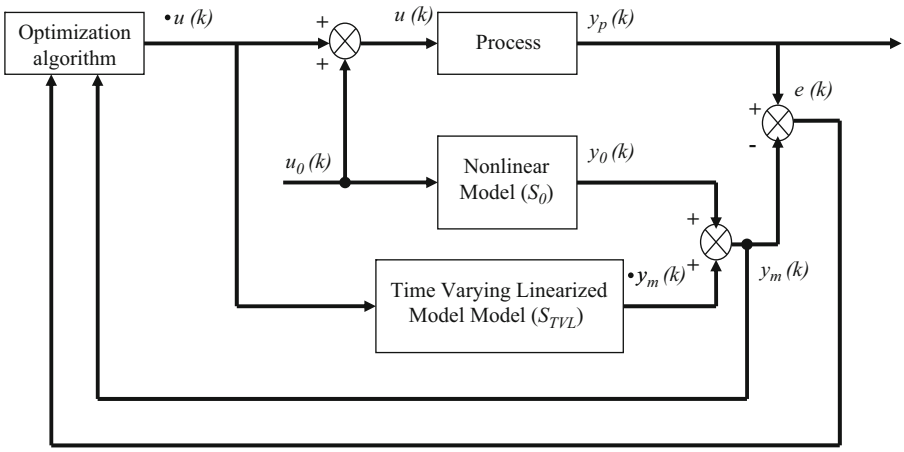

Fig. 2. General linearized IMC-MPC structure (Dufour et al., 2003).

time k is:

$$\min_{\Delta d} J_{tot}(\Delta d) = \sum_{j=k+1}^{j=k+N_p} h_2(y_{ref}(j), e(k), \Delta y_m(j), \Delta d(k)) \tag{21}$$

with the iterative modified Levenberg–Marquardt based algorithm:

$$\Delta d^{l+1}(k) = \Delta d^l(k) - (\nabla^2 J^l_{tot}(k) + \lambda I)^{-1} \nabla J^l_{tot}(k) \tag{22}$$

where $\nabla J^l_{tot}(k)$ and $\nabla^2 J^l_{tot}(k)$ are the criteria gradient and criteria Hessian with respect to Δd at the iteration l at the time k. This algorithm has been implemented in the MPC@CB software,[1] which is used here.

4. Simulation results and discussion

In order to control the sublimation front position, two closed loop control problems are presented here, assuming various availability of measurement used in the feedback loop:

- First, a trajectory tracking for a temperature (measured at the bottom of the sample) is used for inferential control of the sublimation front position.
- Secondly, the maximization of the constrained sublimation front position is used assuming availability of the online measure of the sublimation front position.

In these simulations, one is also interested in verifying the robustness of the controller with respect to uncertainty in a parameter used in the model namely the heat capacity of the frozen layer c_{p2}.

4.1. Simulation conditions

The simulations have been performed under the following conditions:

- Sampling time Te is 60 s.
- In order to be used in the closed loop controller, the PDE model is approximated by a finite difference method, with 10 discretization points in the dried layer and 10 discretization points in the frozen layers.

[1] © University Claude Bernard Lyon 1—EZUS. http://MPC-AT-CB.univ-lyon1.fr

Table 1
Model parameter values.

Parameter	Value	Unit
A	6320.1517	K
B	29.5578	–
c_{p1}	2590	J/kg K
c_{p2}	2500 (nominal case)	J/kg K
c_{pg}	1616.16	J/kg
C^0_{sw}	0.6415	kg water/kg solid
F_{up}	0.795	–
h_v	30	W/K m^2
K_1	0.003	m^2/s
k_{1e1}	2.596×10^{-4}	W m/K N
k_{1e2}	3.9806×10^{-2}	W/m K
k_2	2.1	W/m K
k_d	6.48×10^{-7}	s^{-1}
L	0.01	m
M_w	18×10^{-3}	kg/mol
P_0	5	N/m^2
R_{ig}	8.314	N m/K mol
T^o	233	K
ΔH_s	2840×10^3	J/kg
ΔHv	2687.4×10^3	J/kg
ρ_1	60	Kg/m^3
ρ_{1e}	60	Kg/m^3
ρ_2	1030	Kg/m^3
σ	5.67×10^{-8}	W/m^2 K^4

- The values of the parameters of the model (9)–(11) are as reported in Table 1.
- The manipulated variable is subjected to the magnitude constraints in the following form:

$$\begin{cases} T_{\min} \le u(t) = T_{lp}(t) = T_{up}(t) \le T_{\max}, \quad \forall t > 0 \\ T_{\min} = 220\,\text{K} \\ T_{\max} = 260\,\text{K} \end{cases} \tag{23}$$

- In order to obtain a good quality product, the product temperature should never exceed its eutectic (or glass transition) temperature T_g. Indeed, if this temperature is exceeded, ice in the vial begins to liquefy and the concentrated phase temperature increases above T_g. Therefore the measured temperature at the bottom of the vial has to satisfy:

$$\begin{cases} T_2(z = L, t) \le T_g, \quad \forall t > 0 \\ T_g = 243\,\text{K} \end{cases} \tag{24}$$

Author's personal copy

- In order to understand the influence of the uncertainty of the heat capacity value in the frozen layer c_{p2} used in the model, several conditions have been simulated assuming:
  - the heat capacity of the frozen layer in the simulated process takes its nominal value, which is also used in the model.
  - the heat capacity of the frozen layer in the simulated process is either 24% or 50% bigger than the heat capacity of the frozen layer used in the model (the model is still assuming a nominal case).

The robustness of the controller with respect to this uncertainty is of major importance to validate the control approach. This aspect is discussed in the results.

4.2. Criteria for results analysis

In order to compare the various runs, several criteria are used:

- the final time $t_{final,}$ which is the time when the sublimation front has reached the bottom of the vial at the end of the primary drying stage.
- the normalized root mean square (*NRMS*) error for the tracking (*NRMSET*) which represents, for a given run, the tracking error between the reference to track and the process output that has to track this reference:

$$NRMSET = 100 * \left(\sqrt{\frac{\sum_{k=1}^{k=N_k} (y_{ref}(k) - y_p(k))^2}{N_k}} \right) * \frac{1}{(\max_k y_{ref}(k) - \min_k y_{ref}(k))} \tag{25}$$

  where k is the time t at the current sampled time and N_k is the number of time samples of the considered run.
- the *NRMS* difference (*NRMSD*) which represents the variation of the same considered process output, obtained in the nominal run (run0) and in a run made under different numerical conditions (run1):

$$NRMSD = 100 * \left(\sqrt{\frac{\sum_{k=1}^{k=N_k} (y_{run0}(k) - y_{run1}(k))^2}{N_k}} \right) * \frac{1}{(\max_k y_{run0}(k) - \min_k y_{run0}(k))} \tag{26}$$

  where k is the time t at the current sampled time. Since run0 and run1 may have different duration, N_k is the number of time samples of the fastest run;
- the sublimation front mean velocity (*SFMV*) during a run:

$$SFMV = \sqrt{\frac{\sum_{k=1}^{k=N_k} \left(\frac{dH}{dt}(k) \right)^2}{N_k}} \tag{27}$$

  where k is the time t at the current sampled time and N_k is the number of time samples of the considered run.

4.3. Open loop control analysis

Simulation results under open loop control, obtained with a constant value for u during the run, are presented. These results allow evaluating the impact of uncertainty in the value of the heat capacity of the frozen layer c_{p2} over the position of the sublimation front and the temperature at the bottom of the vial. Fig. 3 shows the sublimation front position (top) and the temperature at the bottom of the vial (bottom) for the same open loop control value (250.2 K), but for three different uncertainties in the heat capacity of the frozen layer. The larger the value of this heat capacity, the higher the temperature, hence reducing the sublimation time.

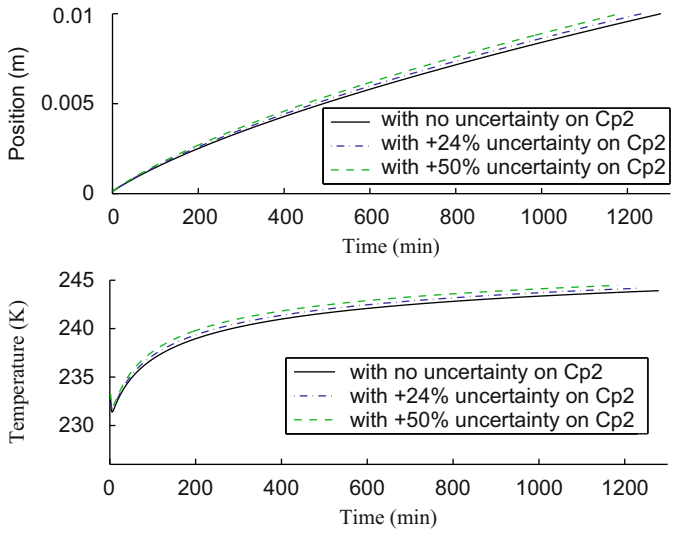

Fig. 3. Open loop control case for various uncertainties in the heat capacity of the frozen layer: sublimation front position (top) and temperature at the bottom of the vial (bottom).

Table 2
Open loop control case for various uncertainties in the heat capacity of the frozen layer: influence of the modeling error in c_{p2} on the comparison criteria.

Uncertainty in c_{p2} (%)	*NRMSD* (%)	t_{final} (min) [% *variation with nominal case*]
0 (nominal case)	0	1278 [*0*]
+24	2.9	1232 [−*3.6%*]
+50	6.4	1182 [−*7.5%*]

These results are summarized in Table 2: the variations of t_{final} and the *NRMSD* range between 0% and 10%. It tells us that if c_{p2} is not well known, the dynamics of the sublimation front position and temperature at the bottom of the vial may change, hence changing the duration of the primary drying stage. Therefore, it can be concluded that uncertainty in the specific heat has a strong impact over the outputs. In order to get a tight control of the sublimation front position at the end of the primary drying stage, a closed controller should therefore be used.

4.4. Inferential closed loop control of the sublimation time by temperature trajectory tracking

In order to be able to control the sublimation front position in the case of uncertainty in heat capacity of the frozen layer, a first closed loop control approach is presented here: one assumes that the temperature at the bottom of the sample is measured (or estimated by a model-based sensor Velardi et al., 2005, 2009). It allows an inferential closed loop control of the key variable of interest: the sublimation front position. The optimization problem (13) may be written here as the following trajectory tracking problem:

$$\min_u \quad J(u) = \sum_{j=k+1}^{j=K+N_p} (y_{ref}(j) - y_p(j))^2 \tag{28}$$

Author's personal copy

where the manipulated variable $u(t)$ is the heating plate temperature $T_{up}(t)$, the controlled variable $y_p(t)$ is the measured temperature T_2 (z=L,t), and the input constraints (23) have to be satisfied. Here, the idea is to see how a prescribed reference behavior y_{ref} may be tracked on-line. This prescribed reference behavior may be tuned in two manners: (1) as a solution of an offline constrained model-based optimal problem (Dufour et al., 2004), in terms of drying time and final end-use properties of the product in the present case, or (2) based on practical knowledge to get an acceptable final product. Today, modeling of the end-use properties of the product based on the drying cycle does not yet exist. Therefore, it is assumed that the reference behavior y_{ref} is defined under some practical aspects: it is defined as a first rise of the controlled temperature with a constant ramp (to speed up the drying), then the temperature is kept at a constant value (to homogenize the space dependant dynamics). Finally, this behavior is repeated to increase the temperature to finish the drying. The linearization of (12) is obtained after some trial and error (in terms of results obtained during the minimization of the cost function) about the behavior of (S_0) given by u_0=236.6 K. The prediction horizon is 6 min. The optimization procedure runs until the end of the primary drying stage, i.e. when the position of the sublimation front in the process $H(t)$ reaches the length L.

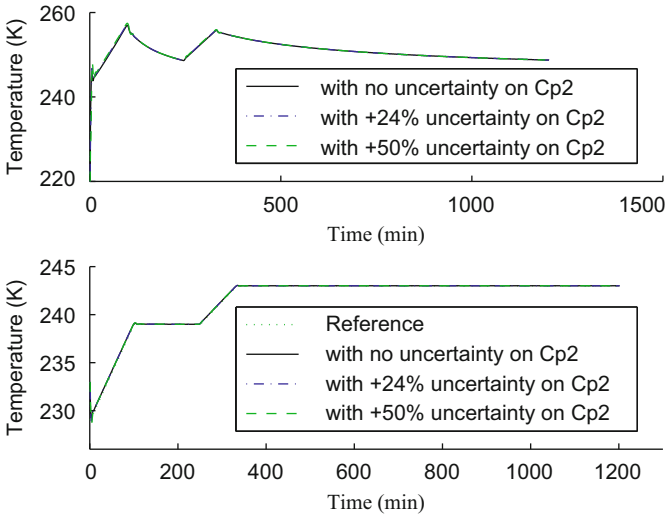

Fig. 4. Inferential closed loop control case for various uncertainties in the heat capacity of the frozen layer: temperatures in the heating plate (top) and at the bottom of the vial (bottom).

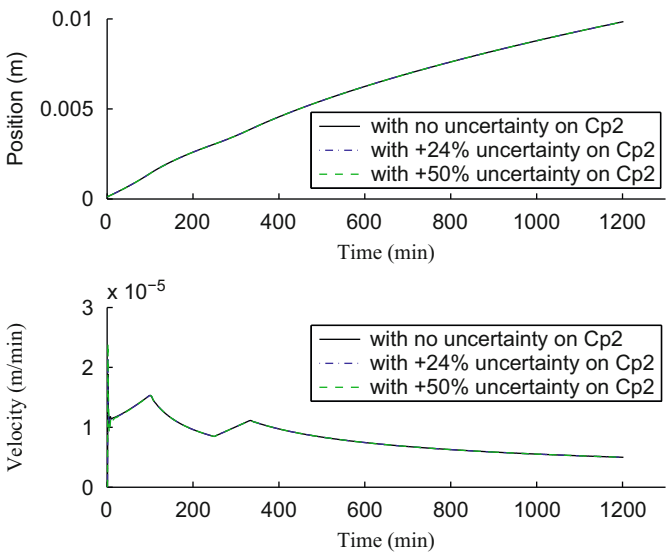

Fig. 5. Inferential closed loop control case for various uncertainties in the heat capacity of the frozen layer: sublimation front position (top) and sublimation front velocity (bottom).

Fig. 4 represents the evolution of the manipulated boundary temperature (top) and the controlled temperature (bottom) during the drying time: the tracking is very accurate, in spite of the uncertainty introduced in the heat capacity of the frozen layer of the simulated process.

In the meantime, the inferential control of the sublimation front position is efficient (Fig. 5) since it follows almost the same trajectory (top) in the three cases, hence decreasing the variation of the time at the end of the simulation. These results are summarized in Table 3: the variations of t_{final}, the *NRMSD* and the *NRMSET* are $<1\%$, and the sublimation front mean velocity (bottom of Fig. 5) is almost similar in all cases. Using a closed loop controller instead of an open loop control policy allows decreasing these criterions by a factor 10, which allows a repeatability of the runs under parameter uncertainty. In that sense, the closed loop controller features a robust property, and allows an inferential control of the sublimation front position.

4.5. Minimization of the sublimation time under constraint

In order to decrease the sublimation time, a second closed loop control approach is presented here based on the availability of the online measure of the sublimation front position (Velardi et al., 2005, 2009). It allows a direct control of the velocity of the sublimation front move. The optimal reduction of the drying time may be equivalent to define the optimal problem (13) as the maximization of the velocity of the sublimation interface $dH(t)/dt$:

$$\min_u J = \sum_{j=k+1}^{j=k+N_p} \frac{1}{\left\| \vartheta + \frac{dH}{dt}(j) \right\|^2} \tag{29}$$

where ϑ is a small positive parameter introduced to avoid division by zero. The constraints for the manipulated variable (23) and process output (24) have to be satisfied, and limit the minimization of t_{final}. For the operating conditions, after trial and error, u_0 has been retuned to 239.22 K. The prediction horizon is 20 min. The optimization procedure, based on the MPC@CB

Table 3
Inferential closed loop control case for various uncertainties in the heat capacity of the frozen layer: influence of the modeling error in c_{p2} on the comparison criteria.

Uncertainty in c_{p2} (%)	*NRMSET* (%)	*NRMSD* (%)	t_{final} (min) [% variation with the nominal case]	*SFMV* (m/min) [% variation with the nominal case]
0 (nominal case)	0.96	0	1201	8.50×10^{-6}
+24	0.98	0.17	1201 [−0.0%]	8.50×10^{-6} [+0.01%]
+50	1.03	0.33	1191 [−0.8%]	8.53×10^{-6} [+0.3%]

Author's personal copy

software, runs until the end of the primary drying stage, i.e. when the position of the sublimation front in the process $H(t)$ reaches the length L.

Fig. 6 represents the evolution of the manipulated boundary temperature (top) and the controlled temperature (bottom) during the drying time. The optimization results show consistent closed loop performance, in spite of the uncertainty introduced in the heat capacity of the frozen layer in the simulated process. Similarly, the optimization of the sublimation front velocity is efficient (bottom of Fig. 7) and is almost similar in the three cases. Therefore, compared to the trajectory tracking problem, it allows decreasing the duration of the primary drying stage. Moreover, the output constraint (24) is always satisfied and limits the sublimation front velocity when it becomes saturated (about 170 min). These results are summarized in Table 4: the variations of t_{final}, the mean velocity of the sublimation front, the *NRMSD* for the temperature at the front are $<0.5\%$, which allows a consistent performance of the drying process under parameter uncertainty. Moreover, solving such constrained optimal control problem instead of a closed loop trajectory tracking problem allows decreasing the sublimation time up to 7%. In that sense, this closed loop controller also features a robust property, and allows the minimization of the sublimation front position, while preserving the prescribed product properties.

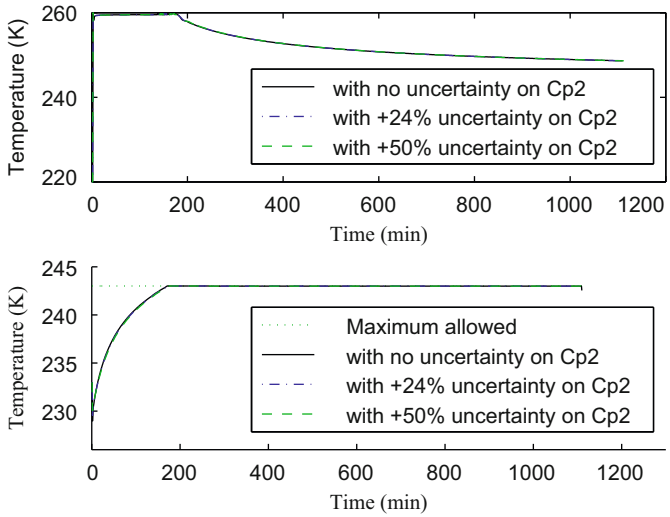

Fig. 6. Constrained minimization of the sublimation time case for various uncertainties in the heat capacity of the frozen layer: temperatures in the heating plate (top) and at the bottom of the vial (bottom).

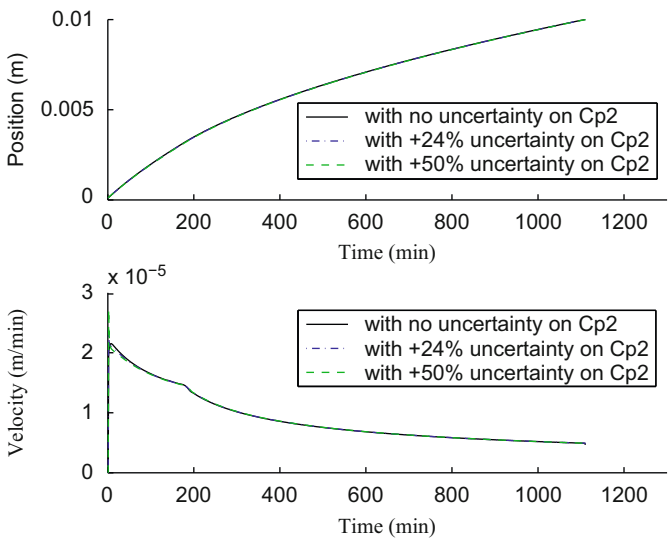

Fig. 7. Constrained minimization of the sublimation time case for various uncertainties in the heat capacity of the frozen layer: sublimation front position (top) and sublimation front velocity (bottom).

5. Conclusions

This study tackled the model-based predictive control of the primary drying stage of the freeze drying process. The aim was to control online the sublimation front position (hence the drying time) in order to obtain dried products of highest quality at lower cost, in spite of a large parameter uncertainty in the model used in the controller. Due to the lack of online sensors, two closed loop control approaches were proposed to control the sublimation front position. First, a trajectory tracking of the measured temperature (at the bottom of the vial) allowed the inferential control of the unmeasured sublimation front position with an accuracy of 1%, in spite of a large uncertainty of the value of the heat capacity in the frozen layer (+50%). Secondly, a direct minimization of the sublimation time was shown, with the same accuracy. Compared to the first control approach, the second control approach allowed decreasing the sublimation time up to 7%, while keeping the measured temperature inside a prescribed set (that allowed preserving final physical properties of the product). Compared to the open loop cases, the process performances could therefore be improved in spite of the approximations and the modeling errors introduced in the model based online optimizer: it allowed a repeatability of the runs even with parameter uncertainty.

Acknowledgment

The authors acknowledge the AUF (Agence Universitaire de la Francophonie) for funding this postdoctoral position.

Table 4
Constrained minimization of the sublimation time case for various uncertainties in the heat capacity of the frozen layer: Influence of the modeling error in c_{p2} on the comparison criteria.

Uncertainty in c_{p2} (%)	*NRMSD* (%)	t_{final} (min) [% variations: with the nominal case, and with the trajectory tracking problem]	SFMV (m/min) [% variations: with the nominal case, and with the trajectory tracking problem]
0 (nominal case)	0	1109 [*0%*] [*−7.7%*]	9.88×10^{-6} [*0%*] [*+16.2%*]
+24	0.26	1110 [*+0.09%*] [*−7.6%*]	9.86×10^{-6} [*−0.2%*] [*+16.0%*]
+50	0.50	1111 [*+0.18%*] [*−6.7%*]	9.84×10^{-6} [*−0.4%*] [*+15.4%*]

Author's personal copy

References

Barresi, A.A., Velardi, S.A., Pisano, R., Rasetto, V., Vallan, A., & Galan, M. (2009). In-line control of the lyophilization process a gentle pat approach using software sensors. *International Journal of Refrigeration*, *32*(5), 1003–1014.

Besançon, G. (2007). *Non-linear Observers and Applications. Lecture Notes in Control and Information Science*. Berlin: Springer. p. 363.

Boss, E.A., Filho, R.M., & Vasco de Toledo, E.C. (2004). Freeze drying process: Real time model and optimization. *Chemical Engineering and Processing*, *43*(12), 1475–1485.

Brülls, M., & Rasmuson, A. (2002). Heat transfer in vial lyophilisation. *International Journal of Pharmaceutics*, *246*(1–2), 1–16.

Chouvenc, P., Vessot, S., Andrieu, J., & Vacus, P. (2004). Optimization of a freeze-drying cycle: A new model for pressure rise analysis. *Drying Technology*, *22*(7), 1577–1601.

Christofides, P.D., El-Farra, N., Li, M., & Mhaskar, P. (2008). Model-based control of particulate processes. *Chemical Engineering Science*, *63*, 1156–1172.

Damak, T. (2007). Procedure for asymptotic state and parameter estimation of non-linear distributed parameter bioreactors. *Applied Mathematical Modeling*, *31*, 1293–1307.

Delgado, A.E., & Sun, D.W. (2001). Heat and mass transfer models for predicting freezing processes—a review. *Journal of Food Engineering*, *47*(3), 157–174.

De Temmerman, J., Dufour, P., Nicolaï, B., & Ramon, H. (2009). MPC as control strategy for pasta drying processes. *Computers and Chemical Engineering*, *33*(1), 50–57.

Diehl, M., Bock, H.G., Schlöder, J.P., Findeisen, R., Nagy, Z., & Allgöwer, F. (2002). Real-time optimization and nonlinear model predictive control of processes governed by differential-algebraic equations. *Journal of Process Control*, *12*, 577–585.

Doyle, F.J., III (1998). Non-linear inferential control for process applications. *Journal of Process Control*, *8*(5–6), 339–353.

Dubljevic, S., & Christofides, P.D. (2006). Predictive control of parabolic PDEs with boundary control actuation. *Chemical Engineering Science*, *61*, 6239–6248.

Dubljevic, S., Mhaskar, P., El-Farra, N.H., & Christofides, P.D. (2005). Predictive control of transport-reaction processes. *Computers and Chemical Engineering*, *29*(11–12), 2335–2345.

Duda, J.L., Malone, M.F., Notter, R.H., & Vrentas, J.S. (1975). Analysis of two-dimensional diffusion-controlled moving boundary problems. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, *18*(7–8), 901–910.

Dufour, P. (2006). Control engineering in drying technology: Review and trends. *Drying Technology*, *24*, 889–904.

Dufour, P., Touré, Y., Blanc, D., & Laurent, P. (2003). On non-linear distributed parameter model predictive control strategy: On-line calculation time reduction and application to an experimental drying process. *Computers and Chemical Engineering*, *27*, 1533–1542.

Dufour, P., Touré, Y., Michaud, D.J., & Dhurjati, P.S. (2004). A partial differential equation model predictive control strategy: Application to autoclave composite processing. *Computers and Chemical Engineering*, *28*(4), 545–556.

Fissore, D., Velardi, S.A., & Barresi, A.A. (2008). In-line control of a freeze-drying process in vials. *Drying Technology*, *26*(6), 685–694.

Fletcher, R. (1987). *Practical methods of optimization*. New York: Wiley.

Hottot, A., Andrieu, J., Hoang, V., Shalaev, E., Gatlin, L.A., & Ricketts, S. (2009). Experimental study and modeling of freeze-drying in syringe configuration part II: Mass and heat transfer parameters and sublimation end-points. *Drying Technology*, *27*(1), 49–58.

Hottot, A., Andrieu, J., Shalaev, E., Gatlin, L.A., & Ricketts, S. (2009). Experimental study and modeling of freeze-drying in syringe configuration. Part I: Freezing step. *Drying Technology*, *27*(1), 40–48.

Hottot, A., Daoussi, R., & Andrieu, J. (2006). Thermophysical properties of aqueous and frozen states of BSA/water/Tris systems. *International Journal of Biological Macromolecules*, *38*, 225–231.

Hottot, A., Peczalski, R., Vessot, S., & Andrieu, J. (2006). Freeze drying of pharmaceutical proteins in vials: Modelling of freezing and sublimation step. *Drying Technology*, *24*(5), 561–570.

King, C.J. (1971). *Freeze-drying of foods*. Cleveland, OH: CRC Press.

Li, M., & Christofides, P.D. (2008). Optimal control of diffusion–convection-reaction processes using reduced-order models. *Computers and Chemical Engineering*, *32*, 2123–2135.

Liapis, A.I., & Bruttini, R. (1994). A theory for the primary and secondary drying stages of the freeze drying of pharmaceutical crystalline and amorphous solutes; comparison between experimental data and theory. *Separation Technology*, *4*, 144–155.

Liapis, A.I., & Litchfield, R.J. (1979a). Optimal control of a freeze dryer—I: Theoretical development and quasi steady state analysis. *Chemical Engineering Science*, *34*, 975–981.

Liapis, A.I., & Litchfield, R.J. (1979b). Numerical solution of moving boundary transport problems in finite media by orthogonal collocation. *Computers and Chemical Engineering*, *3*, 615–621.

Liapis, A.I., Pikal, M.J., & Bruttini, R. (1996). Research and development needs and opportunities in freeze drying. *Drying Technology*, *14*, 1265–1300.

Litchfield, R.J., & Liapis, A.I. (1982). Optimal control of a freeze Dryer—II: Dynamic analysis. *Chemical Engineering Science*, *37*(1), 45–55.

Liu, Y., Zhao, Y., & Feng, X. (2008). Exergy analysis for a freeze-drying process. *Applied Thermal Engineering*, *28*(7), 675–690.

Lombraña, J.I., & Díaz, J.M. (1987a). Heat programming to improve efficiency in a batch freeze-drier. *Chemical Engineering Journal*, *35*(3), B23–B30.

Lombraña, J.I., & Díaz, J.M. (1987b). Coupled vacuum and heating power control for freeze-drying time reduction of solutions in phials. *Vacuum*, *7*(5–6), 473–476.

Lombraña, J.I., & Villarán, M.C. (1997). The influence of pressure and temperature on freeze-drying in an adsorbent medium and establishment of drying strategies. *Food Research International*, *30*(3–4), 213–222.

Mahmood, M., & Mhaskar, P. (2008). Enhanced stability regions for non-linear process systems using model predictive control. *A.I.Ch.E. Journal*, *6*, 1487–1498.

Maidi, A., Diaf, M., & Corriou, J.P. (2009). Boundary geometric control of a counter-current heat exchanger. *Journal of Process Control*, *19*(2), 297–313.

Mascarenhas, W.J., Akay, H.U., & Pikal, M.J. (1997). A computational model for finite element analysis of the freeze-drying process. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, *148*(1–2), 105–124.

Meo, D., III, & Friedly, J.C. (1973). An experimental study of the optimal feedback control of a freeze dryer. *Journal of Food Science*, *38*(5), 826–830.

Nakagawa, K., Hottot, A., Vessot, S., & Andrieu, J. (2007). Modeling of freezing step during freeze-drying of drugs in vials. *A.I.Ch.E. Journal*, *53*(5), 1362–1372.

Padhiyar, N., & Bhartiya, S. (2009). Profile control in distributed parameter systems using lexicographic optimization based MPC. *Journal of Process Control*, *19*(1), 100–109.

Pikal, M.J. (2006). *Freeze drying encyclopedia of pharmaceutical technology* (3rd ed). London: Taylor & Francis.

Qin, S.J., & Badgwell, T.A. (2003). A survey of industrial model predictive control technology. *Control Engineering Practice*, *11*(7), 733–764.

Ravindran, S.S. (2007). Optimal boundary feedback flow stabilization by model reduction. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, *196*, 2555–2569.

Sadikoglu, H., & Liapis, A.I. (1997). Mathematical modelling of the primary and secondary drying stages of bulk solution freeze-drying in trays: Parameter estimation and model discrimination by comparison of theoretical results with experimental data. *Drying Technology*, *15*, 791–810.

Sadikoglu, H., Liapis, A.I., & Crosser, O.K. (1998). Optimal control of the primary and secondary drying stage of bulk solution freeze drying in trays. *Drying Technology*, *16*, 399–431.

Sadikoglu, H., Ozdemir, M., & Seker, M. (2003). Optimal control of the primary drying stage of freeze drying of solutions in vials using variational calculus. *Drying Technology*, *21*, 1307–1331.

Sane, S. U., Hsu, C. C., 2008. Mathematical model for a large-scale freeze-drying process: A tool for efficient process development and routine production (Vol B). In *Proceedings of the 16th international drying symposium* (pp. 680–688). Hyderabad, India.

Schäfer, A., Kühl, P., Diehl, M., Schlöder, J., & Bock, H.G. (2007). Fast reduced multiple shooting methods for nonlinear model predictive control. *Chemical Engineering and Processing*, *46*, 1200–1214.

Sheehan, P., & Liapis, A.I. (1998). Modeling of the primary and secondary drying stages of the freeze-drying of pharmaceutical products in containers: Numerical results obtained from the solution of a dynamic and spatially multi-dimensional lyophilization model for different operational policies. *Biotechnology and Bioengineering*, *60*, 712–728.

Tang, X., Nail, S.L., & Pikal, M.J. (2005). Freeze-drying process design by manometric temperature measurement: Design of a smart freeze-dryer. *Pharmaceutical Research*, *22*(4), 685–700.

Velardi, S. A. (2004). *Freeze-drying: Modelling monitoring and control*. Ph.D. thesis of the Politecnico di Torino Italy.

Velardi, S.A., & Barresi, A.A. (2008). Development of simplified models for the freeze-drying process and investigation of the optimal operating conditions. *Chemical Engineering Research and Design*, *86*(1), 9–22.

Velardi, S. A., Hammouri, H., Barresi, A. A. (2005). A non-linear observer for real-time monitoring and control of the freeze-drying process of pharmaceuticals in vial. In *Proceedings of the joint conference of AFSIA and drying working group of EFCE* (pp. 28–29), Paris, France.

Velardi, S.A., Hammouri, H., & Barresi, A.A. (2009). In-line monitoring of the primary drying phase of the freeze-drying process in vial by means of a Kalman filter based observer. *Chemical Engineering Research and Design*, *87*(10), 1409–1419.

Zavala, V.M., & Biegler, L.T. (2009). Optimization-based strategies for the operation of low-density polyethylene tubular reactors: nonlinear model predictive control. *Computers and Chemical Engineering*, *33*(10), 1735–1746.

Computers and Chemical Engineering 33 (2009) 50–57

Contents lists available at ScienceDirect

Computers and Chemical Engineering

journal homepage: www.elsevier.com/locate/compchemeng

MPC as control strategy for pasta drying processes

J. De Temmerman[a,*], P. Dufour[b,c], B. Nicolaï[a], H. Ramon[a]

[a] BIOSYST – MeBioS, K.U. Leuven, Kasteelpark Arenberg 30, B-3001 Leuven, Belgium
[b] Université de Lyon, Lyon F-69003, France
[c] Université Lyon 1; CNRS UMR 5007 LAGEP (Laboratory of Process Control and Chemical Engineering), 43 bd du 11 novembre, 69100 Villeurbanne, France

ARTICLE INFO

Article history:
Received 12 September 2007
Received in revised form 30 May 2008
Accepted 24 June 2008
Available online 4 July 2008

Keywords:
Drying process
Model predictive control
Nonlinear distributed parameter system
First principle model
Moisture content

ABSTRACT

This study focuses on the drying process of pasta in a convectional air drying oven. A model predictive control algorithm is designed, based on a dynamic model describing the mass transfer between pasta and the surrounding air. The multiple input single output control algorithm minimizes a cost function over a prediction horizon which represents the deviation of the process from a desired reference track, thereby incorporating the working limitations of the oven. The performance of the controller and the influence of the prediction horizon are examined in this paper, showing minimal deviation between process and reference track.

© 2008 Elsevier Ltd. All rights reserved.

1. Introduction

Drying is one of the most energy intensive industrial processes with applications in a wide variety of industries including food industry and construction industry (Nimmol, Devahastin, Swasdisevi, & Soponronnarit, 2007). Traditional convective drying processes, which are performed in batchwise operations, employ continuous constant air temperature and relative humidity for moisture removal. The rate of migration of the moisture from within the pasta to the evaporation front often controls the overall drying rate for a batch of pasta (De Temmerman, Verboven, Nicolaï, & Ramon, 2007). Thus, for optimal energy consumption and improved quality, it is important to match the energy demand of the product during drying with the external supply of energy. Moreover, optimal control of the moisture content and the efficient application of the energy inputs during drying reduce the drying times and hence the energy consumption. Control of drying operations is therefore helpful, in addition to reduce the cost of production and increase the quality (Menshutina & Kudra, 2001; Perera, 2005). Whereas control techniques are widely used in many industries, the number of applications of control in drying is relatively still modest (Dufour, 2006). The use of control tools has started to emerge in drying applications only since 1979. In a second phase started around 1998, new trends based on optimization of a performance function solved by optimal control tools appeared. Since 1992, emerging applications have appeared with few papers in painting, pharmaceuticals, paper and wood applications (Dufour, 2006). However, control structures for drying processes of pasta are not yet studied and applied for industrial use. Control actions in industrial companies are nowadays manually installed based on the practical process knowledge of the operators.

This research is concentrated around the efficient control during pasta drying. Presently, since the moisture content is unknown and uncontrolled during drying, pasta is industrially dried to a moisture level which is much lower than the legal threshold value for microbial safety. The implementation of an efficient controller will enable the process to be followed and to be directed towards a referential track, which is formulated as a function of quality aspects, economical imperatives and consumer concerns. The energy consumption can then be reduced by the efficient tracking of the moisture concentration in pasta, i.e., no additional energy will be spilled by the control actions (air temperature and relative humidity) to remove the extra unnecessary percentages of water out of the pasta with the consequence of a reduction in drying time. In process industry, pasta is namely dried to moisture contents, lower than the critical values for microbial contamination as the process moisture concentrations cannot be measured online during production and biological variations in pasta materials influence the final moisture concentration. To reduce the (often unnecessary) last percentages of moisture out of pasta, long drying times are needed, consuming lots of energy. Control structures combined with online process measurements are therefore useful to reduce the drying time, and therefore the energy consumption.

* Corresponding author. Tel.: +32 16 321922; fax: +32 16 328590.
E-mail address: jeroen.detemmerman@biw.kuleuven.be (J. De Temmerman).

0098-1354/$ – see front matter © 2008 Elsevier Ltd. All rights reserved.
doi:10.1016/j.compchemeng.2008.06.004

Nomenclature

a	Arrhenius function of the air temperature (m^2/s)
b	diffusion constant
Co	constraint function for the process output constraints
D	diffusion coefficient (m^2/s)
DMC	dynamic matrix control
e	difference between process and model output (kg/kg)
F_d	nonlinear function of the partial differential equation
F_{b_0}, F_{b_L}	nonlinear functions for the boundary conditions
f_{amp}	difference between f_{max} and f_{moy} at the instant time
f_{max}	maximal constraint input at the instant time
f_{min}	minimal constraint input at the instant time
f_{moy}	average constraint input of f_{min} and f_{max} at the instant time
GPC	generalized predictive control
h_m	mass convection coefficient (m/s)
I	identity matrix
J	cost function incorporating the deviation of the process from the reference
J_{tot}	total cost function
j	future discrete time index
k	actual discrete sampling time index
k_p	proportional tuning factor ([kg °C]/kg) or (kg/kg)
k_i	integral tuning factor ([kg °C]/[kg s]) or (kg/[kg s])
k_d	derivative tuning factor ([kg °C s]/kg) or ([kg s]/kg)
L	smallest pasta thickness (m)
LTV	linear time varying
MISO	Multiple Input Single Output
MPC	model predictive control
N_p	prediction horizon
p	unconstrained manipulated input variable
Δp	unconstrained parameter variation around p_0
PDE	partial differential equation
RH	relative humidity (kg/kg)
S_{LTV}	linearized time-varying model, solved on-line
S_{NL}	nonlinear model
S_0	particular solution of the nonlinear model for the input $u_0(t)$ and state $X_0(\xi, t)$, solved off-line
T_{air}	air temperature (°C)
t	time (s)
u	input variable consisting of drying air temperature and relative humidity
Δu	small variation around the input u
u_{max}	maximal constraint input
u_{min}	minimal constraint input
$\dot{u}_{max}$	maximal velocity for the input
$\dot{u}_{min}$	minimal velocity for the input
X	moisture concentration in pasta on dry basis (kg/kg)
X_0	initial moisture concentration in pasta on dry basis (kg/kg)
ΔX	small variation around X (kg/kg)
y_m	model output
Δy_m	linearized output around y_0
y_0	nonlinear model output solved offline
y_p	process output
y_p^{MAX}	maximal tolerated moisture concentration
y_p^{MIN}	minimal tolerated moisture concentration
y_{ref}	trajectory track
ξ	Lagrangian coordinate (m)
ξ_L	total length of the pasta expressed as a Lagrangian coordinate (m)
ε	tolerance factor
λ	blending factor
ω	positive defined weight factor
ψ	volumetric shrinkage coefficient
∂	partial derivative operator
∇	gradient operator
∇^2	Hessian operator

In this work, a model predictive control system for pasta drying is built. The idea of model predictive control can be traced back to the 1960s (Bosley, Edgar, Patwardhan, & Wright, 1992; Garcia, Prett, & Morari, 1989). However, interest in this field started to surge only in the 1980s after publication of the first papers on IDCOM (Richalet, Rault, Testud, & Papon, 1978) and dynamic matrix control (DMC) (Cutler & Ramaker, 1980) and the first comprehensive exposition of generalized predictive control (GPC) (Clarke, Mohtadi, & Tuffs, 1987a, 1987b). DMC was conceived to tackle the multivariable constrained control problems typical for the oil and chemical industries. In DMC, these problems were handled by single loop controllers augmented by various selectors, overrides, decouplers, time-delay compensators, etc. (Morari & Lee, 1999). GPC was intended to offer a new adaptive control alternative. In the tradition of adaptive control input–output (transfer function) models were employed. The GPC approach is not suitable or, at the very least, awkward for multivariable constrained systems which are much more commonly encountered in the oil and chemical industries than situations where adaptive control is needed (Morari & Lee, 1999). Essentially all vendors have adopted a DMC-like approach (Qin & Badgwell, 1997). The initial research on MPC is characterized by attempts to understand DMC, which seemed to defy a traditional theoretical analysis because it was formulated in a non-conventional manner. Many MPC approaches have been proposed along the past three decades, most of them based on a receding-horizon strategy, i.e., at each sampling instant k the following actions are taken (Giovanini, 2003):

- The plant measurements are updated for use in the feedback/feedforward control loop,
- the plant model is used to predict the output response to a hypothetical set of future control signals,
- a function including the cost of future control actions and future deviations from a reference behavior is optimized to give the best future control sequence, and
- the first movement of the optimal control sequence is applied.

These operations are repeated at time $k+1$. The main advantage of MPC is its ability to address long time delays, inverse responses, significant nonlinearities, multivariable interactions and constraints (Giovanini, 2003). The widespread use and success of MPC applications described in the literature attest to the improved performance of MPC compared to the classical control algorithm for control of difficult process dynamics.

However, due to the strong nonlinear character of the equations, a numerical solution technique must be used to solve these equations. The computational effort varies somewhat because some solution methods require only that a feasible (and not necessarily optimal) solution be found or that only an improvement be achieved from time step to time step. Nevertheless the effort is usually formidable when compared to the linear case and stopping with a feasible rather than optimal solution can have unpredictable

consequences for the performance. The computational effort can be greatly reduced when the system is linearized first in some manner and then the techniques developed for linear systems are employed online. Nevistic (1997) showed excellent simulation results when a linear time varying (LTV) system approximation is used, which is calculated at each time step over the predicted system trajectory (Lee & Ricker, 1994). Zheng (1997, 1998) used the MPC formulation in a closed-loop control strategy while reducing the online computational demand. The nonlinear MPC control law was thereby approximated by a linear controller which linearized the nonlinear model and assumed no constraints. The linear controller was then used to compute all future control moves. The online computation effort was significantly reduced in this manner since only the first control move was computed by solving the optimization problem.

A time-varying linear MPC algorithm based on Dufour and Touré (2004) will be developed for this research. In order to control the drying of pasta, it is necessary to model the drying process at a fundamental level. The governing transport equation for moisture content is formulated on the basis of a nonlinear partial differential equation (PDE). To provide an insight into the drying process and to elucidate the physics of the transport phenomena that arise during drying, it is necessary to solve this system. The MPC structure which takes into account constraints for the model input and output, is developed afterwards. Experimental results reveal the applicability of the MISO (Multiple Input Single Output) MPC structure in pasta drying companies.

2. General model structure

The drying process of pasta was modelled with an uncoupled mass transfer model based on Fick's law for flat pasta (De Temmerman et al., 2007). The mass transfer balance was founded on an internal moisture transport mechanism governed by the moisture gradient and interpreted mathematically based on an effective diffusion coefficient in Fick's law. The transport kinetics are entirely controlled by the internal transport resistance (De Temmerman et al., 2007). The time and spatially dependent diffusion coefficient determines the internal transport kinetics totally and hence the overall drying time for moisture removal out of pasta (Migliori, Gabriele, de Cindio, & Pollini, 2005; Villeneuve & Gélinas, 2007). Moreover, calculations of the Fourier number confirm that the diffusion in pasta is the time determining key factor during drying. Moisture transport was assumed to be one-dimensional along the smallest pasta thickness L. The surface of the pasta was surrounded by air with well-known properties (air temperature and relative humidity) on one side while the pasta was insulated with aluminum-foil on the other side. The shrinkage of pasta is included in the model by considering it as a one-directional phenomenon with a volume reduction, only attributed to the moisture loss. The unidirectional Fickian diffusion equation which relates moisture concentration to time and space is formulated as (De Temmerman et al., 2007):

$$\frac{\partial X}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial \xi}\left[\left(\frac{D(X, T_{\text{air}})}{(1+\psi X)^2}\right)\frac{\partial X}{\partial \xi}\right] \quad \text{for } t > 0 \text{ and } 0 < \xi < L \tag{1}$$

in which

$$D(X, T_{\text{air}}) = a(T_{\text{air}})\exp(bX) \quad \text{for } t > 0 \tag{2}$$

in which t is the time in s and ξ the Lagrangian coordinate in m. $X(\xi,t)$ represents the moisture concentration in the pasta on dry basis, expressed in kg/kg, $D(X,T_{\text{air}})$ the diffusion coefficient in m^2/s, ψ the volumetric shrinkage coefficient, a an Arrhenius function of T_{air} in m^2/s, b a dimensionless constant of the diffusion coefficient and ∂ the partial derivative operator.

The initial and boundary conditions for the mass transport were formulated as:

$$t = 0\,\text{s} : X = X_0 \quad \text{for } 0 < \xi < \xi_L \tag{3}$$

$$t > 0\,\text{s} : -\frac{D(X, T_{\text{air}})}{(1+\varepsilon X)^2}\frac{\partial X}{\partial \xi} = 0 \quad \text{for } \xi = 0 \tag{4}$$

$$t > 0\,\text{s} : -\frac{D(X, T_{\text{air}})}{(1+\varepsilon X)^2}\frac{\partial X}{\partial \xi} = h_{\text{m}}(T_{\text{air}})(c(T_{\text{air}}, X) - c_\infty(T_{\text{air}}, \text{RH})) \quad \text{for } \xi = \xi_L \tag{5}$$

in which X_0 represents the initial (assumed uniform) moisture concentration in the pasta in kg/kg, ξ_L the total length of the pasta expressed in the Lagrangian coordinate in m, h_{m} the mass convection coefficient in m/s, RH the relative humidity of the drying air and T_{air} the air temperature of the drying air in °C. The numerical values and the expressions of all model parameters are shown in detail in another study (De Temmerman et al., 2007). Fick's model equation with the distributed diffusion parameter, combined with the boundary and initial conditions can only be solved by numerical discretization techniques. This model describes the moisture concentration in pasta as a function of the input parameters, the drying air temperature and the relative humidity. The model can be considered as a MISO model. This MISO model has in general the form of:

$$\frac{\partial X}{\partial t} = F_{\text{d}}\left(\frac{\partial^2 X}{\partial \xi^2}, \frac{\partial X}{\partial \xi}, X, T_{\text{air}}\right) \tag{6}$$

$$F_{\text{b}_0}\left(\left.\frac{\partial X}{\partial \xi}\right|_{\xi=0}, X\big|_{\xi=0}, T_{\text{air}}\right) = 0 \tag{7}$$

$$F_{\text{b}_L}\left(\left.\frac{\partial X}{\partial \xi}\right|_{\xi=\xi_{\text{L}}}, X\big|_{\xi=\xi_{\text{L}}}, T_{\text{air}}, \text{RH}\right) = 0 \tag{8}$$

in which F_{d} is the nonlinear function of the partial differential equation, while F_{b_0} and $F_{\text{b}_{\text{L}}}$ are nonlinear operators for the boundary conditions at the surface impermeable for moisture transport and at the surface in contact with the surrounding air respectively. This MISO model is named a S_{NL} model which stands for the nonlinear drying system. This model is the basis on which the MPC structure is built.

3. MPC formulation

MPC refers to a control strategy in which the dynamic model Eqs. (6)–(8) are used to predict and optimize the drying process. In this control application, the drying process is optimized by internal model control for the manipulated input variable consisting of both drying air temperature and relative humidity $u(t) = [T_{\text{air}}(t)\ \text{RH}(t)]$. The control problem is solved by calculating S_0 offline (S_0 is S_{NL} obtained with $u(t) = u_0(t)$), while S_{LTV} is computed online during MPC optimization. The offline model S_0, the online model S_{LTV} and the difference e between the process and model outputs then replace the nonlinear model S_{NL} into the optimization. This linearized model contributes to a significant reduction in online computational time. It must be taken into account that communication between the control software and the online measuring system requires a non-negligible time. Therefore, within this strategy of calculating a part of the solution offline, the remaining time between two successive measuring points can be used efficiently to find an optimal solution that performs well with the MPC algorithm.

The control objective is then to find the variation $\Delta u(t)$ of the manipulated variable $u(t)$ around the chosen trajectory $u_0(t)$ lead-

ing to a better online optimization result (Dufour, Touré, Blanc, & Laurent, 2003). The online linearization thus allows adding variations around the general offline calculated trend, reaching a much higher performance for the MPC formulation: more iterations are possible to find the solution, and the control performances are increased.

3.1. General considerations

In the MPC formulation, the nonlinear system S_{NL} is divided into a particular representation S_0 of S_{NL} and a linearized term, named S_{LTV}. S_0 stands for the particular solution of the nonlinear model for the input $u_0(t)$ and state $X_0(\xi, t)$, while S_{LTV} represents a time-varying linearized model, obtained by small variations $\Delta u(t) = [\Delta T_{air}(t)\ \Delta RH(t)]$ and $\Delta X(\xi\ t)$ around respectively the input $u_0(t)$ and state $X_0(\xi, t)$. This linearized model is described by Dufour et al. (2003):

$$\frac{\partial \Delta X}{\partial t} = A_d^2(t)\frac{\partial^2 \Delta X}{\partial z^2} + A_d^1(t)\frac{\partial \Delta X}{\partial z} + A_d^0(t)\Delta X + B_d(t)\Delta T_{air} \tag{9}$$

$$A_{b_0}^1(t)\frac{\partial \Delta X}{\partial z} + A_{b_0}^0(t)\,\Delta X + B_{b_0}^T(t)\,\Delta T_{air} = 0 \tag{10}$$

$$A_{b_L}^1(t)\frac{\partial \Delta X}{\partial z} + A_{b_L}^0(t)\,\Delta X + B_{b_L}^T(t)\,\Delta T_{air} + B_{b_L}^{RH}(t)\,\Delta RH = 0 \tag{11}$$

The time varying linear operators in these equations are obtained from the linearization of S_{NL} around the behavior described by S_0 (Friedly, 1972).

3.2. Control objective

The control objective of pasta drying is a trajectory tracking for the average moisture concentration of pasta. The average moisture concentration is forced to follow a reference curve, which is formulated in industry as a function of the actual consumer and legal requirements. The reference curves are namely a function of quality aspects (no cracking of pasta is allowed, minimal brownness is required) and legal limitations (maximal tolerated moisture content). They are given by an industrial pasta firm. In this study, a standard referential curve of an industrial pasta firm was taken. To follow such reference track, input and output constraints must be taken into account. A cost function is formulated here for the drying process, which is minimized by the MPC control algorithm.

3.2.1. Input constraints

The input parameters of the considered drying model are constrained by their working area and by the time needed to establish the drying air conditions in the working area. The pasta product in this study was assumed to be dried in an oven [Weiss Technik, Germany] by using temperatures between 1 °C and 100 °C and relative humidity varying from 1% to 100%. The oven considered had a heating velocity of 1.5 °C/min and a cooling velocity of −3 °C/min. The velocity for changes in relative humidity was measured under several constant and variable air temperatures, indicating a humidity velocity for both humidification and dehumidification of ±0.5%RH/min. These limitations on the working area of the oven were taken into the controller mathematically as:

$$u_{min} \le u \le u_{max} \tag{12}$$

$$\dot{u}_{min} \le \dot{u} \le \dot{u}_{max} \tag{13}$$

in which u_{min} and u_{max} represent the minimal and maximal constraint input, while $\dot{u}_{min}$ and $\dot{u}_{max}$ are the minimal and maximal velocity for the input. In order to be used in the control algorithm, explicit constraints on the manipulated input parameter u require a transformation method to translate the input parameters into an unconstrained parameter p. Therefore the following transformation equation is used (Dufour et al., 2003):

$$u = f_{moy} + f_{amp}\ \tan h\left(\frac{p - f_{moy}}{f_{amp}}\right) \tag{14}$$

with

$$f_{moy} = \frac{f_{max} + f_{min}}{2} \tag{15}$$

$$f_{amp} = \frac{f_{max} - f_{min}}{2} \tag{16}$$

$$f_{max} = \min(u_{max}, u(j-1) + \dot{u}_{min}) \tag{17}$$

$$f_{min} = \max(u_{min}, u(j-1) + \dot{u}_{max}) \tag{18}$$

and the future discrete times j at each current discrete time k is:

$$j \in \{k+1, \ldots, k+N_p\} \tag{19}$$

At each sampling time k, the working range for the input parameters is calculated starting from the previous input $u(k-1)$. The maximal and minimal input velocities $\dot{u}_{min}$ and $\dot{u}_{max}$ are therefore added and subtracted to the previous input and compared with the overall tolerated working zone limits, defined by u_{min} and u_{max} (Eqs. (17) and (18)). The average value f_{moy} and amplitude value f_{amp} of the working range are consequently considered (Eqs. (15) and (16)) and used to transform the constrained input parameter u into the unconstrained parameter p, which is used further on in the MPC optimization algorithm. The control move is then physically feasible at any time and at any iteration: the constrained input parameter u determines the working range for the inputs of the drying model.

3.2.2. Output constraints

The average moisture concentration of pasta is assumed to follow a reference track during air drying to satisfy food quality, concerning product stability, texture and color. In order to produce high quality pasta, the evolution of the average moisture concentration must be situated between minimal and maximal boundaries. These constraints on the process output are formulated as a band around the reference track in which deviations between the process and reference curve are tolerated. Concentrations falling out of the toleration band have to be forced to move towards the reference curve by the control algorithm. The concentration limits for the moisture contents are mathematically expressed:

$$Co_i(y_p(t), u(t)) \le 0 \tag{20}$$

in which Co_i represents the constraint function for the process output constraints. The constraint functions Co_1 and Co_2 in this study represent the transforming functions for the maximal and minimal tolerated moisture concentrations $y_p^{MAX}(t)$ and $y_p^{MIN}(t)$ around the reference track respectively:

$$Co_1 = \left(\frac{y_p(t)}{y_p^{MAX}(t)} - 1\right) \tag{21}$$

$$Co_2(t) = \left(1 - \frac{y_p(t)}{y_p^{MIN}(t)}\right) \tag{22}$$

3.2.3. Linearization

The small input variations $\Delta u(t)$, small state variations $\Delta X(\xi,t)$ and small output variations $\Delta y_m(t)$ are used in the time-varying linearized model S_{LTV}. The offline solved nonlinear model S_0 and the online solved time-varying linearized model S_{LTV} with the

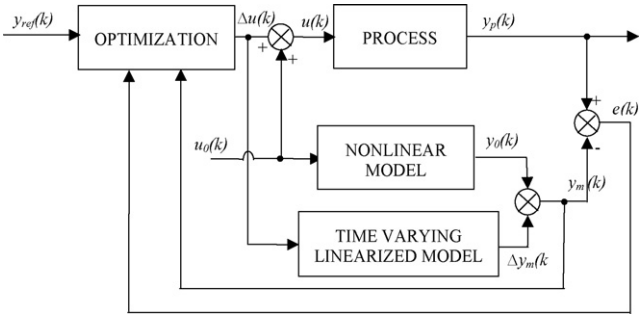

Fig. 1. General MPC structure used.

error $e(t)$ then replace the initial nonlinear model S_{NL}, while the model output $y_m(t)$ is defined as the sum of the nonlinear offline solved output $y_0(t)$ and the linearized output $\Delta y_m(t)$ (Fig. 1).

Moreover, by discrete time formulation, the time dependent input, output and states can be expressed as a function of the discrete time index j, defined by Dufour and Touré (2004). The process output $y_p(j)$ is then:

$$y_p(j) = y_0(j) + \Delta y_m(j) + e(k) \tag{23}$$

in which the difference $e(k)$ between the process and model outputs is assumed constant over the prediction horizon. This error $e(k)$ is also fed back in the controller and is updated at each time k. Therefore, two feedback loops are used to adjust process performances (Fletcher, 1987).

The small variations $\Delta u(j)$ can be reformulated as unconstrained parameter variations $\Delta p(j)$ based on Eq. (14). The control objective is then to find the variation $\Delta p(t)$ of the unconstrained manipulated variable $p(t)$ about the chosen trajectory $p_0(t)$ leading to a better online optimization result. As a consequence the output constraints (Villeneuve & Gélinas, 2007) are then considered as:

$$\mathrm{Co}_i(y_0(j), \Delta y_m(j), e(k), \Delta p(j)) \leq 0 \tag{24}$$

3.2.4. Cost function

A cost function J_{tot} is introduced to quantify the deviation of the process from the reference behavior and the positioning of the process output compared to the concentration band around the reference curve. The output constraints are taken into account in the second term of J_{tot} by adopting the exterior penalty method where a positive defined weighted penalty term is added to the initial cost function J (Fletcher, 1987):

$$\min_{\Delta p} J_{tot} = J(j) + J_{ext}(j) = J(j) + \omega_i \max^2(0, \mathrm{Co}_i(j)) \tag{25}$$

where $J(j)$ incorporates the deviation of the process from the reference behavior and ω_i is a positive defined weight that increases when the output constraints tend to be checked and decreases when they do not tend to be checked (Fletcher, 1987). For any constraint Co_i not checked, the weight ω_i penalizes the minimization task. This enforces the optimizer to minimize $J_{ext}(j)$ and hence to enforce the violated constraints to be checked. The problem is thus transformed into an unconstrained penalized optimization problem by substituting a penalty function for the constraint (Fletcher, 1987).

Minimization of the cost function J_{tot} is obtained by manipulating the input parameters Δp of the model, thereby taking into account the constraints on the input:

$$\min_{\Delta p} J_{tot} = \sum_{k=1}^{N_p} \left(\left[\frac{(y_{ref}(j) - [y_0(j) + \Delta y_m(j) + e(k)])}{y_{ref}(j)} \right]^2 + \omega_1 \max^2(0, \mathrm{Co}_1(j)) + \omega_2 \max^2(0, \mathrm{Co}_2(j)) \right) \tag{26}$$

where k stands for the actual discrete time, $y_{ref}(j)$ for the future trajectory track, $y_0(j)$ for output of the S_0 model, $\Delta y_m(j)$ for output of the S_{LTV} model, $e(k)$ for the difference between process and model output, while ω_1 and ω_2 are the penalization factors for $\mathrm{Co}_1(j)$ and $\mathrm{Co}_2(j)$.

3.3. Control algorithm

To optimize the input parameter Δp at each time k, the Levenberg–Marquardt algorithm is used due to its robustness, simplicity and convergence criteria. In this optimization algorithm the argument Δp_{i+1} is calculated starting from Δp_i by the following iteration:

$$\Delta p_{i+1} = \Delta p_i - (\nabla^2 J_{tot} + \lambda I)^{-1} \nabla J_{tot} \tag{27}$$

in which λ represents a blending factor which is recalculated at each iteration, I is the identity matrix, while ∇ is the gradient and ∇^2 the Hessian with respect to Δp_i. In Fig. 1 the structure of the MPC loop is shown.

3.4. IMC PID control

The developed control strategy can also be used for IMC PID control. The difference between the referential value and process value at each process time (the error e), which is now not evaluated over a prediction horizon, forms the basis to predict $u(t)$ as the output of the PID controller and is mathematically expressed as:

$$u(t) = k_p e + k_i \int e \, dt + k_d \frac{d(e)}{dt} \tag{28}$$

The input parameter $u(t)$ of the considered drying model is also constrained by their working area and its limits are identical as explained for MPC.

4. MPC simulation results

The objective of the MPC system is to tune the input parameters that minimize the deviation between the process output and reference track. The average moisture concentration in pasta is controlled by adapting the input parameters of the system, namely the air temperature and relative humidity. The working area for the air temperature is constrained between 1 °C and 100 °C and for the relative humidity between 1% and 100%. The considered heating and cooling velocity are constrained to 1.5 °C/min and −3 °C/min respectively, while the relative humidity change is constrained to ±0.5%RH/min. The process output is considered by calculating S_0 offline, while S_{LTV} is computed online during MPC optimization. The S_0 model was calculated for $u_0(t)$ = [49.5 10], in which the first number stands for the drying air temperature (in °C) and the second number for the relative humidity (in %). The sampling time was set to 60 s for a total drying process of 5000 s. The initial average moisture concentration of pasta in the model was assumed to be 47.7%. Deviations were introduced to check the adequacy and robustness of the controller: in order to create deviations between the actual process and model, the initial average moisture concentration of the process was set to 48.5%, while the diffusion coefficient of the

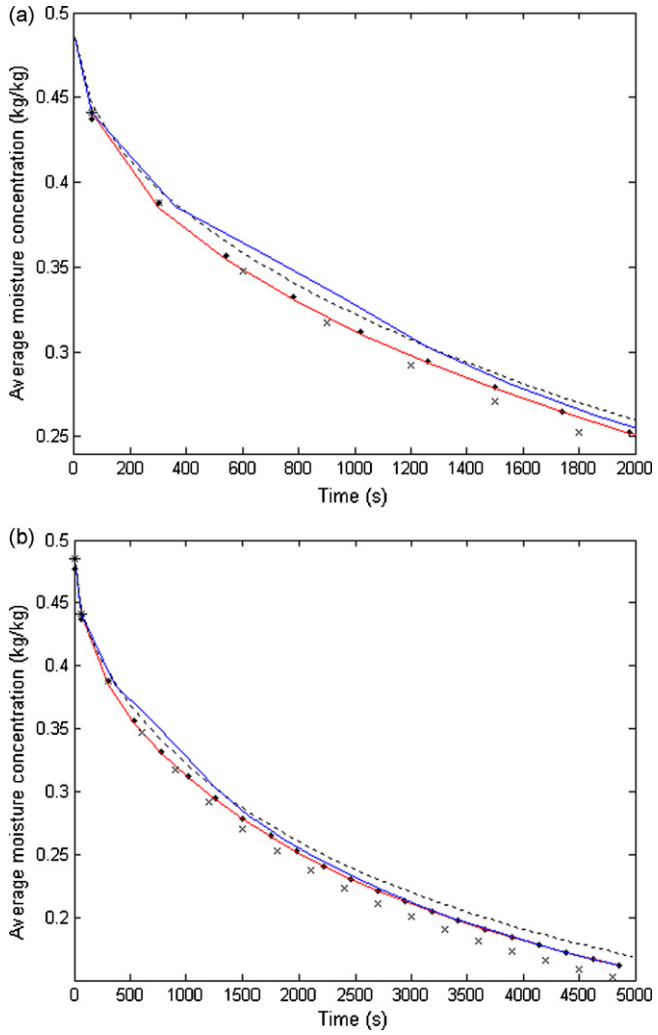

Fig. 2. Reference trajectory tracking: reference curve (···) for the drying process output: with open loop control while $u = u_0 = [49.5\,^{\circ}\mathrm{C}\ 10.0\%]$ (×) and $u = u_0 = [45.0\,^{\circ}\mathrm{C}\ 20.0\%]$ (- - -), with the MISO PID (blue line) and with the MISO MPC (red line) with a 5 point horizon prediction, each case with uncertainties: 1.68% error on the initial moisture concentration and 10.0% error on the diffusion coefficient.

process model was raised with 10.0%. Moreover real processes only deviate from the simulated models by parameter deviations. The real process can then be assumed as a process model with parameter deviations. However, online implementation requires highly precise measuring systems for the moisture content, evaluated over 60 s, which are not available for the moment, but are under development. For the implementation, the MPC@CB software developed under Matlab was used.[1]

In Fig. 2 convergence of the process towards the reference track is shown for various control strategies. The deviation between the drying process and reference track is minimal with the MPC. Since a higher diffusion coefficient of the model than in the process speeds up the modeled drying, the MPC controller has to intervene in the control loop by decreasing the air temperature or/and increasing the relative humidity in order to direct the process towards the reference curve. The small temperature increase at the beginning of the drying process is caused by the deviation in the initial moisture concentration of the process, after which the temperature

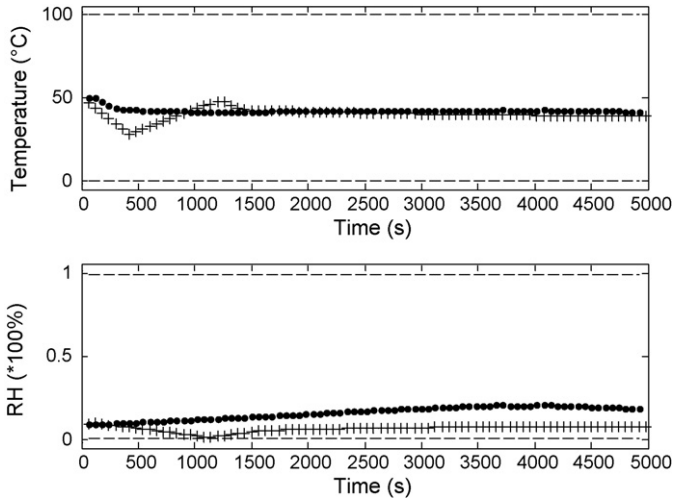

Fig. 3. Constrained manipulated variable magnitude: minimal and maximal allowed temperature and relative humidity magnitude (- - -) together with the actual temperature and relative humidity for the MISO PID (+++) and the MISO MPC (···) with a 5 point horizon prediction, each case with uncertainties: 1.68% error on the initial moisture concentration and 10.0% error on the diffusion coefficient.

decreases to counterbalance the effect of the diffusion coefficient for the simulated process. With a prediction horizon consisting of 5 points considered for the MPC control algorithm, the root mean squared error (RMSE) between the average moisture concentration of the process and the reference track is 0.30% for this simulated process, which indicates the adequacy and performance are very good. The control magnitudes for the MPC strategy are shown in Fig. 3 together with the minimal and maximal allowed input: the constrained control magnitudes are situated between the specified boundaries. The increase or decrease in the manipulated input variables is limited between two consecutive sampling points due to the constraints on the input variations caused by the oven used (Fig. 4).

In the first open loop case, the input magnitudes still remain constant at 49.5 °C and 10% and do not counterbalance for the higher diffusion coefficient or the deviating initial moisture concentration.

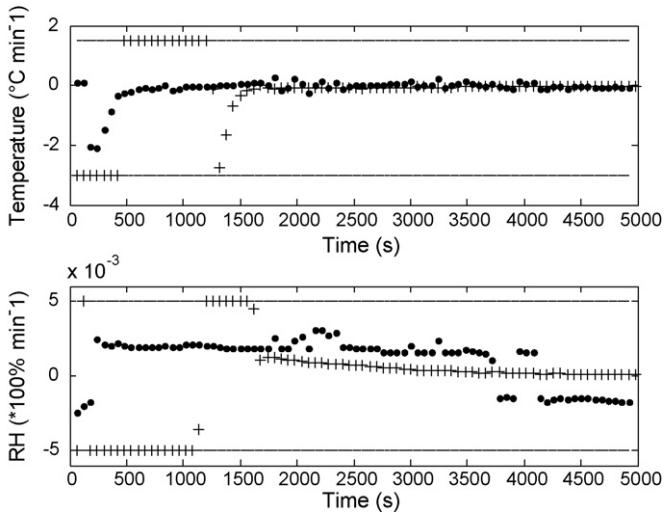

Fig. 4. Variation in constrained manipulated variable magnitudes: minimal and maximal allowed temperature and relative humidity variation (- - -) together with the actual variation in temperature and relative humidity between the successive sampling instants for the MISO PID (+++) and the MISO MPC (···) with a 5 point horizon prediction, each case with uncertainties: 1.68% error on the initial moisture concentration and 10.0% error on the diffusion coefficient.

[1] ©University Claude Bernard Lyon 1—EZUS. In order to use MPC@CB, please contact the author: dufour@lagep.univ-lyon1.fr.

Table 1
PID tuning parameters k_p, k_i and k_d for air temperature and relative humidity control

Air temperature	k_p [(kg dry solids °C)/kg water]	−2500.0
	k_i [(kg dry solids °C)/(s kg water)]	−2.0
	k_d [(kg dry solids °C s)/kg water]	-1×10^{-3}
Relative humidity	k_p [(kg dry solids)/kg water]	6.0
	k_i [(kg dry solids)/s kg water]	1×10^{-3}
	k_d [(kg dry solids s)/kg water]	1×10^{-3}

The uncontrolled process shows divergence from the reference track after 800s which only increases afterwards as there is no control action for this open loop system (Fig. 2). The RMSE between the average moisture concentration of the process and the concentration of the reference track for the open loop system is 4.36%.

Additionally, another open loop control case is given in Fig. 2 for the drying conditions at 45.0 °C and 20%, indicating again divergence from the referential curve. The drying air temperature of 45.0 °C is not adequate to reach the referential curve as remained constant because there is no control (RMSE = 4.12%).

An internal MISO PID, replacing the MISO MPC system is unable to take prediction horizons into account and hence cannot foresee the process. The optimal internal PID specifications are given in Table 1. The PID controller does not perform as well as the MPC controller (RMSE = 1.98%). The process is not controlled optimally by the PID between 500 s and 1500 s due to the lack of process evaluation over a prediction horizon. However, there is no bad impact of the PID controller on the tracking results. The constrained manipulated control magnitudes (temperature and relative humidity) for the applied internal MISO PID are given in Fig. 3. In Fig. 4, the variation in constrained manipulated control magnitudes between the successive sampling instants is shown for the MISO MPC and MISO PID controller. It is demonstrated that the inputs for the MISO PID controller are sometimes saturated, while the inputs of the MISO MPC system are situated between their maximal heating, cooling and humidification and dehumidification velocity.

The same MISO MPC control strategy is performed for prediction horizons including 2, 3, 4, 5, 7, 10 and 15 points. The deviation between process and reference track is therefore also minimal. The influence of longer or shorter prediction horizon on the RMSE is shown in Fig. 5. As optimal prediction horizon, the prediction horizon which minimizes the RMSE is preferred. The optimal prediction horizon is always a function of the type of reference curve and the type of process. In Fig. 5, it is shown that a prediction horizon, consisting of 4 points, is optimal for tracking the reference curve. The prediction horizon has a different effect because the relative importance of the next input is varying for variable prediction horizons. The relative importance for the next applied input value increases for small prediction horizons, while it decreases for longer prediction horizons. Highly varying reference curves, for example, are better tracked by using short prediction horizons as it makes no sense to consider the future process behaviour when the reference is highly varying. The optimal RMSE between the process and reference track average moisture concentration is therefore 0.29%. For longer or shorter prediction horizons, the importance of the prediction horizon for calculating the next process value is respectively under- or overestimated, i.e., the percentage contribution for the next process input value in the prediction horizon is under- or overestimated and hence the prediction horizon is preferred to be shorted or lengthened respectively.

The impact of both input parameters (air temperature and relative humidity) on the process output is analyzed in Fig. 6 based on the sensitivities analysis. The following sensitivity ratio is defined:

$$\text{Ratio}(t) = \frac{d\bar{X}/dT_{air}(t)}{d\bar{X}/dRH(t)} \tag{29}$$

This sensitivity ratio ranges from 10 at the beginning, to 1 at the end. It is therefore obvious that the air temperature has more impact on the process than the relative humidity, explained by its influence on the diffusion process. The impact of the relative humidity is limited as it only intervenes in the boundary condition (Eq. (5)), but increases at the end of the drying process. One may then wonder if this may have an impact in term of closed loop control results, assuming a single input, single output (SISO) MPC structure rather that the MISO MPC structure. In this SISO MPC structure, the air temperature is assumed as input parameter and the relative humidity then remains constant during the whole drying process (RH = 10% is used in the simulations). After some simulations, the RMSE between the average moisture concentration of the process and the reference track is 0.34% for this SISO MPC structure, indicating less adequate performance compared to the MISO model (0.29%). Using a MISO MPC instead of a SISO MPC therefore helps to decrease by 15% the RMSE between these two cases. The influence

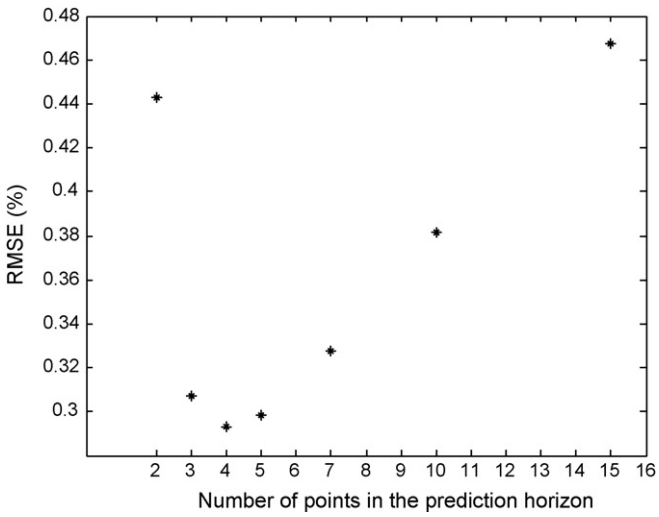

Fig. 5. The impact of the tuning of the prediction horizon of the MPC on the RMSE, each case with uncertainties: 1.68% error on the initial moisture concentration and 10.0% error on the diffusion coefficient.

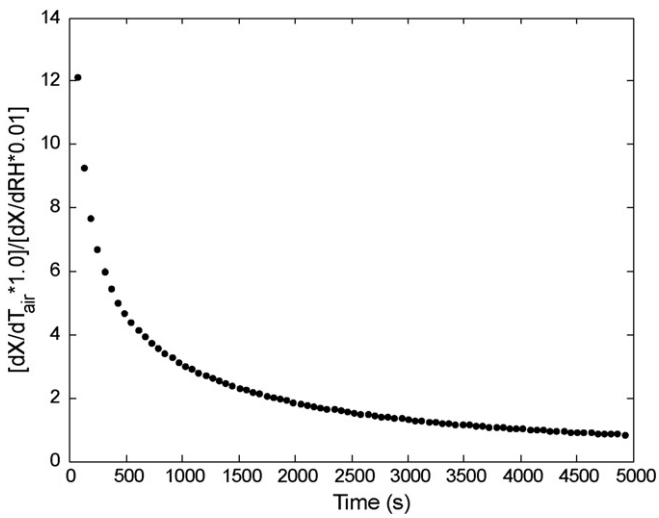

Fig. 6. The ratio between the sensitivities of the air temperature and mean relative humidity with respect to an air temperature input of 1.0 °C and with respect to a relative humidity input of 1.0%, measured for the drying process at 49.5 °C and 10.0%.

Table 2
RMSE (%) between the referential curve and the drying process output: with open loop control while $u = u_0 = [49.5\,^{\circ}\mathrm{C}\ 10.0\%]$ and $u = u_0 = [45.0\,^{\circ}\mathrm{C}\ 20.0\%]$, with SISO and MISO PID, with SISO and MISO MPC, each case with uncertainties: 1.68% error on the initial moisture concentration and 10.0% error on the diffusion coefficient

RMSE (%)	SISO	MISO
Open loop 1 ($u = u_0 = [49.5\,^{\circ}\mathrm{C}\ 10.0\%]$)	–	4.36
Open loop 2 ($u = u_0 = [45.0\,^{\circ}\mathrm{C}\ 20.0\%]$)	–	4.12
PID	2.08	1.98
MPC	0.34	0.29

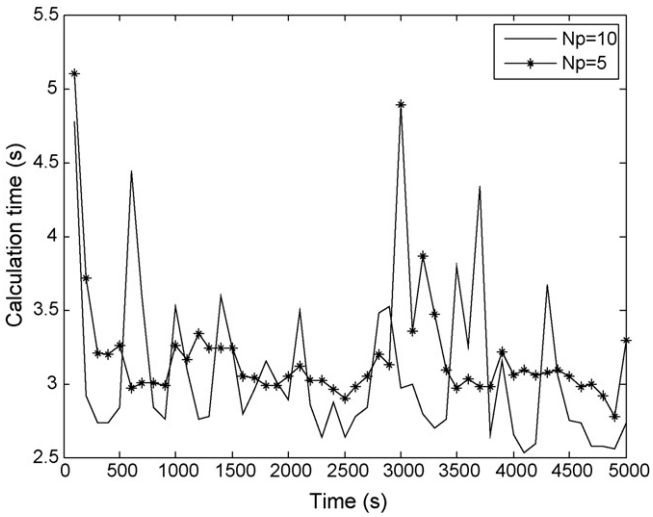

Fig. 7. Time needed by the whole program to compute the control action by the MPC, evaluated for prediction horizons of 5 (—) and 10 (∗) points, each case with uncertainties: 1.68% error on the initial moisture concentration and 10.0% error on the diffusion coefficient.

of the PID controller on the SISO model gives a RMSE of 2.08%, which also has less performance compared to the MISO PID control structure (1.98%). Using a MISO PID instead of a SISO PID therefore helps to decrease by 5% the RMSE between these two cases. Table 2 helps to summarize the RMSE between the referential drying curve and the drying process output in open loop, with SISO and MISO PID controlled systems and with the best tuned SISO and MISO MPC controlled systems. It can be seen that the MISO MPC system is the best control structure during pasta drying processes.

For the MISO MPC structure, it is obvious that the whole calculation time during control calculations is reduced due to the offline calculation of the model. Fig. 7 demonstrates the calculation time for the prediction horizon consisting of 5 points and 10 points. The calculation results show the calculation time needed for the control actions is much lower than the sampling time for process output measuring during implementation (3–5 s versus a sampling time of 60 s for implementation respectively), indicating the control algorithm is very efficient in calculating the control actions. The remaining time between the successive samplings can then be used for the communication between the PC software and the actual process on a laboratory scale (approximately 10 s), and also to use a model based observer in order to estimate online some unknown or time-varying model parameters like the pasta temperature or diffusion coefficient or to recalculate the specified MISO MPC problem in order to find more optimal solutions.

5. Conclusion

In the present study, a distributed parameter model predictive control framework is used based on computationally efficient MPC software for pasta during convectional air drying. The control system is formulated based on an offline nonlinear model and an online time-varying linear model. The MPC controller combines the process output with a Levenberg–Marquardt optimization technique to provide a model predictive control framework that can be supported in an industrial environment. The smaller average deviation between the average moisture concentration of the product and the reference track curve was found to be 0.29% in the MISO MPC case. The proposed MISO MPC produces high performance and accuracy, with relatively small computational cost and gives better results than PID, or SISO MPC with the air temperature as the single input.

The advantage of this developed control structure lies in its practical use. The implementation of the developed control structure is one the possible practical applications of this control structure. The MPC control strategy is therefore considered as a powerful research strategy with a variety of possibilities, even in other application areas such as freezing, painting, etc.

References

Bosley, J. R., Edgar, T. F., Patwardhan, A. A., & Wright, G. T. (1992). Model-based control: A survey. *IFAC Symposia Series*, *8*, 127–136.
Clarke, D. W., Mohtadi, C., & Tuffs, P. S. (1987a). Generalized predictive control. Part 1: The basic algorithms. *Automatica*, *23*(2), 137–148.
Clarke, D. W., Mohtadi, C., & Tuffs, P. S. (1987b). Generalized predictive control. Part 2: Extensions and interpretations. *Automatica*, *23*(2), 149–160.
Cutler, C. R., & Ramaker, B. L. (1980). Dynamic matrix control: a computer control algorithm. In *Proceedings Joint Automatic Control Conference*
De Temmerman, J., Verboven, P., Nicolaï, B., & Ramon, H. (2007). Modelling of transient moisture concentration of semolina pasta during air drying. *Journal of Food Engineering*, *80*(3), 892–903.
Dufour, P. (2006). Control engineering in drying technology: Review and trends. *Drying Technology*, *24*(7), 889–904.
Dufour, P., & Touré, Y. (2004). Multivariable model predictive control of a catalytic reverse flow reactor. *Computers and Chemical Engineering*, *28*, 2259–2270.
Dufour, P., Touré, Y., Blanc, D., & Laurent, P. (2003). On nonlinear distributed parameter model predictive control strategy: Online calculation time reduction and application to an experimental drying process. *Computers and Chemical Engineering*, *27*, 1533–1542.
Fletcher, R. (1987). *Practical methods of optimization*. New York: John Wiley & Sons Ltd.
Friedly, J. C. (1972). *Dynamic behavior of processes*. Englewood Cliffs, NJ: Prentice-Hall Inc.
Garcia, C. E., Prett, D. M., & Morari, M. (1989). Model predictive control: Theory and practice—A survey. *Automatica*, *25*(3), 335–348.
Giovanini, L. L. (2003). Predictive feedback control. *ISA Transactions*, *42*, 207–226.
Lee, J. H., & Ricker, N. L. (1994). Extended Kalman filter based nonlinear model predictive control. *Industrial and Engineering Chemistry Research*, *33*(6), 1530–1541.
Menshutina, N. V., & Kudra, T. (2001). Computer aided drying technologies. *Drying Technology*, *19*(8), 1825–1849.
Migliori, M., Gabriele, D., de Cindio, B., & Pollini, C. M. (2005). Modelling of high quality pasta drying: Mathematical model and validation. *Journal of Food Engineering*, *69*(4), 387–397.
Morari, M., & Lee, J. L. (1999). Model predictive control: past, present and future. *Computers and Chemical Engineering*, *23*, 667–682.
Nevistic, V. (1997). *Constrained control of non linear systems*. PhD thesis. Zürich: ETH-Swiss Federal Institute of Technology.
Nimmol, C., Devahastin, S., Swasdisevi, T., & Soponronnarit, S. (2007). Drying and heat transfer behavior of banana undergoing combined low-pressure superheated steam and far-infrared radiation drying. *Applied Thermal Engineering*, *27*, 2483–2494.
Perera, C. O. (2005). Selected quality attributes of dried foods. *Drying Technology*, *23*, 717–730.
Qin, S. J., & Badgwell, T. A. (1997). An overview of industrial model predictive control technology. In J. C. Kantor, C. E. Garcia, & B. Carnahan (Eds.), *Fifth International Conference on Chemical Process Control* (pp. 232–256). CACHE, AIChE.
Richalet, J., Rault, A., Testud, J. L., & Papon, J. (1978). Model predictive heuristic control: Applications to industrial processes. *Automatica*, *14*, 413–428.
Villeneuve, S., & Gélinas, P. (2007). Drying kinetics of whole durum wheat pasta according to temperature and relative humidity. *LWT—Food Science and Technology*, *40*(3), 465–471.
Zheng, A. (1997). A computationally efficient non linear model predictive control algorithm. In *Proceedings of the American Control Conference*.
Zheng, A. (1998). Non linear model predictive control of the Tennessee–Eastman process. In *Proceedings of the American Control Conference*.

Proceedings of the 29th Chinese Control Conference
July 29-31, 2010, Beijing, China

A Combined Closed Loop Optimal Design of Experiments and Online Identification Control Approach*

Saida FLILA[1], Pascal DUFOUR[1,2], Hassan HAMMOURI[1], Madiha NADRI[1]
1. Université de Lyon, F-69622, Lyon, France;
Université Lyon 1, Villeurbanne;
CNRS, UMR 5007, LAGEP.
43 bd du 11 novembre, 69100 Villeurbanne, France
2. Corresponding author:
E-mail: dufour@lagep.univ-lyon1.fr, www.tinyurl.com/dufourpascal

Abstract: The main contribution of this paper is to propose a new approach, based on any specified continuous nonlinear model, for the combined optimal closed loop control of a process and online identification of a given model parameter. It deals with the optimal design of experiments: the idea is to twofold: first, based on a sensitivity model based predictive control, find the value of the input to apply during the experiment that allows optimizing a criteria based on the sensitivity of the process measure with respect to the unknown model parameter. Secondly, and in the meantime, based on the input/output measures collected, a process model and an observer, estimate online the model parameter. Moreover, constraints dealing with input, state and output limitations are accounted for. The main advantage of this approach is that both optimal control task and identification task are solved together online in order to get the online estimation of the unknown model parameter. This approach is applied here on a simple case in chemical engineering.
Key Words: Nonlinear System, Nonlinear Observer, Parametric Sensitivity, Predictive Control, Optimal Design Of Experiments, Identification.

1 INTRODUCTION

Identification is the task which aims to determine the numerical value of the unknown process model parameters [1, 2], based on experimental data. Unfortunately, due to the possible lack of relevant informations in the experimental data (maybe due the difficulty to get them), some of the parameters may not always be easily identified. In order to know if these data are rich enough to be used for identification, the sensitivity of the process output y_p (the measure) with respect to the unknown process parameter θ tells us how it is possible to identify the parameter from the data. It is usually used to define the Fisher Information Matrix (FIM), whose norm is often used for this kind of study. If the sensitivity of the measured process output with respect to the unknown process parameter is small or null, this may be due to one (or more) of the following problems: 1/ the parameter does not influence this output, or 2/ the output is not well chosen, or 3/ the input signal applied on the process does not sufficiently excite the measure. This work focuses on the third problem: based on a nonlinear model, it deals with the closed-loop control problem for the optimal design of experience [3-5] coupled with the online identification of one process parameter [6, 7]. The main question is: how the input signal, to apply to get the experimental data from the plant, may be optimally tuned online such that the model parameter is estimated at the same time, based on the richest output data (in terms of the norm of the sensitivity $\frac{\partial y_p}{\partial \theta}$) ? Moreover, some constraints have to be specified during the identification phase, in order to have a correct use of the process. In this framework, for nonlinear systems, the authors [8, 9] have presented a methodology to get an optimal design of experiments (DOE), for the parameters estimation in the field of bioreactors. Keesman and Stigter [10] have found analytic solutions for the design of the optimal input u for a parameter estimation based on a specific model. In this case, the control law was obtained explicitly from several differentiations of the optimality condition of Pontryagin $\frac{\partial H}{\partial u} = 0$ (where H is the hamiltonian formulation associated to the model and the cost function, depending on the parametric sensitivity $\frac{\partial y_p}{\partial \theta}$). Stigter, Vries and Keesman [9] have presented another adaptive approach where the input design was solved online for a bioreactor. In this case, the online estimation of the sought model parameters was introduced in the control law design, which is based on the FIM. The online estimation of the parameters was obtained by a recursive estimation algorithm.

In this paper, a new control approach to be used during the identification task is presented, which is based on the optimization of the sensitivity of the process measure with respect to the sought model parameter. In the meantime, the input/output data are used for the online estimation of this parameter, and some constraints are accounted for. This approach, that couples a closed loop controller and an observer, solves at the same time the control task and the parameter estimation task. A dynamic model of parametric sensitivity (obtained explicitly from the process model) is also employed online to get the needed sensitivity of the process measure with respect to the sought model parameter. The closed loop controller is a model predictive controller (MPC), which is also based on the process model. Some constraints may be handle in the optimization task. Since it is formulated in a general framework with realistic assumptions, this method is relatively simple to use for any particular model.

This paper is organized as follow: section 2 aims to recall some basic principles of MPC. Then, in section 3, the new approach for MPC for the closed loop optimal design of experiments for online identification is given. In section 4, results are presented for a case study. In order to simplify

the notation, scalar variables are handled here (for the input, the output and the unknown model parameters), whereas the known model parameters and the state variables may be defined as vectors.

2 MODEL PREDICTIVE CONTROL: SOME RECALLS

Even if the original idea of MPC was given by Bellman in the 1950's, this idea started to be used in the industry only in 1978 with the software IDCOM of Richalet. In 1980, the DMC approach of Cutler and Ramaker appeared. In these 2 approaches, a black-box model was used. Since that time, MPC tools were improved (QDMC, SMOC, IDCOM-M, HEICON, DMC+, RMPCT, etc.). The reader may find in [11] more historical facts about MPC, as well as more precisions about the technical and theoretical evolutions of MPC. According to the authors of this survey, MPC was concerned, in 2003, with more than 4000 applications in total in the world, without adding local solutions. The main idea of MPC is to insert in the feedback loop an element of process behavior prediction. The computer then determines, using the constrained optimization of a criterion J over the prediction horizon N_p, at the current sampled time k, the control sequence to apply over the prediction horizon. At the next sampling time, only the first component of this sequence is applied as the process input. The process measure y_p is updated and the procedure is repeated. Since this control problem is solved numerically, the continuous signals are considered at some discrete times: at the present (resp. future) time of the discretized time k (resp. j), where $t = k * T_s$ (resp. $t = j * T_s$) and where T_s is the sampling period. The MPC aims to solve a general constrained optimization problem defined as:

$$\begin{cases} \min\limits_{\tilde{u}} J(\tilde{u}) = \sum\limits_{j=k+1}^{k+N_p} F\left(y_p(j), x_p(k), u(j-1)\right) \\ \tilde{u} = \{p_u(1), ..., p_u(n_{pu})\} \\ u(j) = f_u(p_u(i), j, k) \; i \in [1, n_{pu}] \\ u \in U \subset \mathbb{R} \\ con_i\left(y_p(k), x_p(k), u(j-1)\right) \leqslant 0 \\ \forall\, k > 0, \;\; \forall\, j \in [k+1, k+N_p], \;\; \forall\, i \in [1, n_{con}] \end{cases} \tag{1}$$

where F represents the control objective (regulation, trajectory tracking, time minimization, etc.), $p_u(i)$ are the elements of the n_{pu} control vector parametrization of the input u over the prediction horizon N_p. The input u is constrained explicitly (magnitude, velocity) by U. There are n_{con} constraints con_i on the measured output y_p and on the process states x_p, which gives implicitly new constraints on the input. Afterwards, the process model is introduced in this formulation to predict the process behavior in the future, which helps to solve numerically the problem. An observer may also be necessary if some of the process states are not measured.

3 APPROACH FOR COMBINED CLOSED LOOP OPTIMAL DESIGN OF EXPERIMENTS AND ONLINE IDENTIFICATION

The sensitivity of the process measure y_p with respect to the model parameter θ determines if this parameter may be identified, based on the input/output data. In this work, we are interested in the case where the input signal u must be optimally tuned to get the richest experimental data fed into the online estimation tool. In this part, a new closed loop optimal control strategy for online identification of an unknown process parameter is presented. A constrained controller and an observer are used, in order to maximize online the sensitivity of the process measure y_p with respect to the model parameter θ , while handling some specified constraints. This approach is based on a (general) continuous (dynamic) nonlinear model of the process, described by ordinary differential equations (ODEs) or by partial differential equations (PDEs). The sensitivity model is explicitly derived from the original process model, and is used in the control law. The optimal input and the parameter estimation are both obtained online, and the parameter estimation is fed back into the control law, as an estimated input disturbance. The various elements of this new control structure are now presented: the initial control problem, a process model, a process observer, the sensitivity model and the final formulation of the constrained optimal problem for identification based on the model.

3.1 Initial formulation of the MPC problem

The initial question is: how to tune online the process input $u(t)$ such that the process measure $y_p(t)$ is the richest (in term of sensitivity) for its use in the online estimation tool ? This may be formulated as a MPC problem, where the sensitivity of the process measure y_p with respect to the model parameter θ must me maximized. In the meantime, during the use of the process for the identification task, some constraints must be satisfied, in order to maintain the process behavior inside a prescribed region:

- first, due to the physical constraints, the input found by the optimization task must be physically acceptable. Indeed, any actuator is limited in magnitude. Velocity limitations may also be present:

$$\begin{cases} u_{min} \leqslant u(t) \leqslant u_{max} \;,\; \forall\, t > 0 \\ \Delta u_{min} \leqslant \frac{du(t)}{dt} \leqslant \Delta u_{max} \;,\; \forall\, t > 0 \end{cases} \tag{2}$$

- the output and state variables must be kept inside a prescribed zone. It deals with safety, stability, or production specifications. These n_c constraints, which depend on the process output and the process state, may be formulated as:

$$\begin{aligned} & c_i(y_p(t), x_p(t), \alpha, \theta, u(t)) \leqslant 0, \;\; \forall\, t > 0... \\ & ...\forall\, i \in \mathrm{I}^{n_c} = \{1, ..., n_c\} \end{aligned} \tag{3}$$

Remark 1 *α and θ are both model parameters, but α is the vector of model parameter with known values, whereas θ is the sought model parameter with unknown value.*

Therefore, the initial constrained optimization problem for identification $(COPI_I)$ may be formulated as:

$$
(COPI_I)\begin{cases}
\max\limits_{\tilde{u}} J(\tilde{u}) = \sum\limits_{j=k+1}^{k+N_p} \left(\frac{\partial y_p}{d\theta}(j)\right)^2 \\
\tilde{u} = \{p_u(1), ..., p_u(n_{pu})\} \\
u(j) = f_u(p_u(i), j, k)\ i \in [1, n_{pu}] \\
\\
\forall k > 0,\ \forall\ j \in [k, k+N_p-1]: \\
\ u_{min} \leqslant u(j) \leqslant u_{max} \\
\ \Delta u_{min} \leqslant \frac{u(j)-u(j-1)}{T_s} \leqslant \Delta u_{max} \\
\forall k > 0,\ \forall\ j \in [k+1, k+N_p], ... \\
...\forall\ i \in \mathrm{I}^{n_c+n_{co}} = \{1, ..., n_c+n_{co}\}: \\
\ c_i\left(y_p(j), x_p(j), \alpha, \theta, u(j-1)\right) \leqslant 0
\end{cases} \tag{4}
$$

The main problem in this formulation (4) is that, at each present time k, it can not be solved. Indeed, it is based on signals into the future j: the sensitivity of the process measure y_p with respect to the model parameter θ, the process measure y_p, the parameter θ and the process state x_p. These future values are not known at the present time k, whereas the process input u and the process measure y_p are the only data available at the present time k. In order to get an optimization problem that is numerically solvable, the idea is to approximate these signals based on the available data and estimations updated at each time k, and on the use of the process model at different steps in an internal model control structure. The elements required for this approximation are presented in the following parts.

3.2 Process model

In this approach, a model of the process is used. It is assumed that it may be represented by a set of nonlinear differential equations:

$$
(M)\begin{cases}
\dot{x}(t) = f(x(t), \alpha, \theta, u(t)), & t > t_i \\
y(t) = h(x(t), \alpha, \theta, u(t)), & t > t_i \\
x(t_i) = x^{t_i}, \quad t = t_i
\end{cases} \tag{5}
$$

where $x \in \mathbb{R}^n$, $u \in U \subset \mathbb{R}$ and $y \in \mathbb{R}$ are respectively the state vector, the input and the output. f and g are nonlinear functions.

Assumption 1 *In the system (5), f et h are C^1.*

3.3 Process observer

One of the use of the observers [6, 7] is dealing with the online parameter estimation problem: indeed, the parameter to estimate may be considered as a new state variable and is combined to the model state to get an augmented state for which an observer has to be designed.

Assumption 2 *The state x_o of the observator (O), constitued of the estimated process state $\hat{x_p}$ augmented with the estimated parameter $\hat{\theta}$, $x_o = [\hat{x_p}\ \hat{\theta}]$, is observable. Moreover, any input u render the system uniformly observable.*

Many factors must be accounted for during the design of such a nonlinear observer: the model class, the observability of the states, the value of the process input and the sensitivity of the measure with respect to the state. Consequently, the synthesis of such an observer is strongly connected to the structure of the model (M) and to the control applied at the process input. Based on the assumption 2 and on the theory of nonlinear system observers, an observer is designed, based on (M), in order to estimate online the process state variables $\hat{x}_p(k)$ and the unknown model parameter $\hat{\theta}$. This parameter is therefore estimated at each sampling period by this observer, and its value is introduced in the predictive controller in order to improve the closed loop performances.

3.4 Sensitivity model

Let us now define the sensitivity model (M_θ) which describes the dynamic of the state vector $x_\theta = \frac{\partial x}{\partial \theta} \in \mathbb{R}^n$ and the output $y_\theta = \frac{\partial y}{\partial \theta} \in \mathbb{R}$: they are respectively the sensitivity of the state of the model (M) with respect to the parameter θ and the sensitivity of the output of the model (M) with respect to the parameter θ.

$$
(M_\theta)\begin{cases}
\dot{x}_\theta(t) = \frac{\partial}{\partial t}\frac{\partial f}{\partial x}\frac{\partial x}{\partial \theta}(t) = ... \\
...f_\theta(x_\theta(t), x(t), \alpha, \hat{\theta}(t), u(t)), & t > t_i \\
y_\theta(t) = \frac{\partial h}{\partial x}\frac{\partial x}{\partial \theta}(t) = ... \\
...h_\theta(x_\theta(t), x(t), \alpha, \hat{\theta}(t), u(t)), & t > t_i \\
x_\theta(t) = x_\theta^{t_i}, \quad t = t_i
\end{cases} \tag{6}
$$

3.5 Final Formulation

The previously described models (M), (M_θ) and the observer (O) are used to predict, in a future time j over the prediction horizon, the value of real signals, based on the actual errors available (at k) between the process and the model. This error is classically assumed constant over the horizon, and is updated at each time k. Therefore, the signals used in the $(COPI_I)$ may be approximated at each time k into future time j:

$$
\begin{cases}
\forall k > 0,\ \forall\ j \in [k+1, k+N_p]: \\
\ x_p(j) = x_m(j) + (\hat{x}_p(k) - x_m(k)) \\
\ y_p(j) = y_m(j) + (y_p(k) - y_m(k)) \\
\frac{\partial y_p}{\partial \theta}(j) = \frac{\partial y_m}{\partial \theta}(j) + (\frac{\partial y_p}{\partial \theta}(k) - \frac{\partial y_m}{\partial \theta}(k)), \\
\forall k > 0: \\
\theta = \hat{\theta}(k),
\end{cases} \tag{7}
$$

where all the following signals are used in the control law:

- $x_m(j)$ is the model state obtained at the time future j, computed at time k, by the resolution of the model (M) over the prediction horizon N_p with the current input sequence $\tilde{u}$, with the initial state $x_m(k)$ and with the estimated parameter $\hat{\theta}(k)$.
- $\hat{x}_p(k)$ is the process state estimated at time $k-1$ by the observer (O), with the best previous input $u(k-1)$, with the initial conditions $[\hat{x}_p(k-1)\ \hat{\theta}(k-1)]^T$. At time $k=0$, $\hat{x}_p(k)$ must be initialized.
- $x_m(k)$ is the model state obtained at time $k-1$ by the resolution of the model (M) from $k-1$ to k, with the best previous input $u(k-1)$, with the initial conditions $\hat{x}_p(k-1)$ and with the estimated parameter $\hat{\theta}(k-1)$. At time $k=0$, $x_m(k)$ must be initialized.
- $y_m(j)$ is the model output given by $x_m(j)$ in (M).
- $y_p(k)$ is the measure available at time k.

- $y_m(k)$ is the model output given by $x_m(k)$ in (M).

- $\frac{\partial y_m}{\partial \theta}(j)$ is the modeled sensitivity of the model output y_m with respect to the parameter θ at time j, computed at time k, with the resolution of the sensitivity model (M_θ) over the prediction horizon N_p, with the current input sequence $\tilde{u}$, with the estimated parameter $\hat{\theta}(k-1)$, coupled with the resolution of the model (M) from the initial conditions $\frac{\partial x_m}{\partial \theta}(k)$.

- $\frac{\partial y_p}{\partial \theta}(k)$ is the modeled sensitivity of the process output y_p with respect to the parameter θ, computed at time $k-1$, by the resolution of the sensitivity model (M_θ) from $k-1$ to k, with the best input $u(k-1)$, with the estimated parameter $\hat{\theta}(k-1)$, with the estimated process state $\hat{x}_p(k-1)$ from the initial conditions $\frac{\partial x_p}{\partial \theta}(k-1)$. At time $k=0$, $\frac{\partial x_p}{\partial \theta}(k)$ must be initialized.

- $\frac{\partial y_m}{\partial \theta}(k)$ is the modeled sensitivity of the model output y_m with respect to the parameter θ, computed at time $k-1$, by the resolution of the sensitivity model (M_θ) from $k-1$ to k, with the best input $u(k-1)$, with the estimated parameter $\hat{\theta}(k-1)$, coupled with the resolution of the model (M) from the initial conditions $\frac{\partial x_m}{\partial \theta}(k-1)$. At time $k=0$, $\frac{\partial x_m}{\partial \theta}(k)$ must be initialized.

- $\hat{\theta}(k)$ is the estimated parameter at time k, computed at time $k-1$ by the observer, with the best previous input $u(k-1)$ and the initial conditions $[\hat{x}_p(k-1)\ \hat{\theta}(k-1)]^T$. At time $k=0$, $\hat{\theta}(k)$ must be initialized.

Based on these approximations, the initial constrained optimization problem for identification $(COPI_I)$ is reformulated as $(COPI_{NL})$, based on the considered nonlinear model of the process (M).

$$\left\{\begin{array}{l}
\max_{\tilde{u}} J(\tilde{u}) \\
J(\tilde{u}) = \sum_{j=k+1}^{k+N_p} \left(\frac{\partial y_m}{\partial \theta}(j) + (\frac{\partial y_p}{\partial \theta}(k) - \frac{\partial y_m}{\partial \theta}(k))\right)^2 \\
\tilde{u} = \{p_u(1), ..., p_u(n_{pu})\} \\
u(j) = f_u(p_u(i), j, k)\ i \in [1, n_{pu}] \\
\text{under the input constraints, } (\forall k > 0): \\
\left\{\begin{array}{l}
u_{min} \leqslant u(j) \leqslant u_{max} \\
\Delta u_{min} \leqslant \frac{u(j)-u(j-1)}{T_s} \leqslant \Delta u_{max} \\
\forall\, j \in [k, k+N_p-1]
\end{array}\right. \\
\text{under the state/output constraints, } (\forall k > 0): \\
\left\{\begin{array}{l}
c_i(y_m(j) + (y_p(k) - y_m(k)), ... \\
...x_m(j) + (\hat{x}_p(k) - x_m(k)), ... \\
...\alpha, \hat{\theta}(k), u(j)) \leqslant 0, \\
...\forall\, j \in [k+1, k+N_p],\ \forall\, i \in \mathrm{I}^{n_c+n_{co}}
\end{array}\right. \\
\text{based on the online resolution of the models} \\
(M), (M_\theta), \text{ on the process measure and on the observor.}
\end{array}\right. \tag{8}$$

This constrained optimization problem allows determining online both the optimal input to apply during the experiment and the value of the unknown parameter: it is an optimal design of experiments for online parameter identification. It may now be solved by any algorithm available for this kind of problem formulation[1].

4 CASE STUDY: SAPONIFICATION

We are now interested in the evaluation of this new optimal control approach for the online identification of a model parameter in a simple case. Saponification is the basic reaction of a base with a fat to produce soap. In this example, the continuous stirred tank reactor contains ethyl acetate (fat) and sodium hydroxide (base) and is assumed to be isothermal. To simplify the study, it is assumed that both concentrations initially inside the reactor and at the reactor input are equals, and that their feed flow rate are identical and constant. A model constituted of one nonlinear ordinary differential equation is written as:

$$\left\{\begin{array}{l}
\dot{C}_a(t) = -k_v C_a^2(t) + \frac{D(t)}{V}(C_{ain} - C_a(t)),\ t > 0 \\
C_a(0) = C_{a0},\ t = 0
\end{array}\right. \tag{9}$$

where the concentration of ethyl acetate $C_a(t)$ inside the reactor (in [mol.l^{-1}]) is both the state x and the measured output y of the process y_p. $D(t)$ is the input flow rate of sodium hydroxide (in [mol.min^{-1}]) to manipulate (i.e., this is the control variable u). In term of parameters, the value of the constant volume of the reactor V (in [l]) and the value of the concentration of ethyl acetate C_{ain} (in [mol.l^{-1}]) at the reactor inlet are known. They are respectively α_1 and α_2, as defined in the remark 1. The reaction rate $\theta_1 = k_v$ (in [l.mol^{-1}.min^{-1}]), assumed to be constant but unknown, has to be determined by this approach. The model (9) may then be reformulated in a more general form following (M_x) in (5), where the state $x = x_1$:

$$(M)\left\{\begin{array}{l}
\dot{x_1}(t) = -\theta_1 x_1^2(t) + \frac{u(t)}{\alpha_1}(\alpha_2 - x_1(t)),\ t > 0 \\
y(t) = x_1(t),\ t > 0 \\
x_1(t) = x_1^0(t),\ t = 0
\end{array}\right. \tag{10}$$

Based on this model, an observer (O) (see the assumption 2) may be designed [12] to estimate $[x_{p1}\ \theta_1]^T$ (with $t > 0$):

$$(O)\left\{\begin{array}{l}
\dot{x_o}(t) = A_o(y_p(t))x_o(t) + ... \\
\qquad ...B_o(u(t)) - S_o^{-1}C^T(Cx_o(t) - y_p(t)),\ t > 0 \\
\dot{S}_o(t) = -\theta_o S_o(t) + A_o^T(y_p(t))S_o(t) - ... \\
\qquad ...S_o(t)A_o(y_p(t)) + C^T C,\ t > 0
\end{array}\right. \tag{11}$$

where θ_o is the observer tuning parameter and (with $t > 0$):

$$\left\{\begin{array}{l}
A_o(y_p(t)) = \begin{pmatrix} 0 & -y_p^2(t) \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \\
B_o(u(t)) = \begin{pmatrix} \frac{u(t)}{\alpha_1}(\alpha_2 - y_p(t)) \\ 0 \end{pmatrix} \\
C = [1\ 0]
\end{array}\right. \tag{12}$$

The model (M_θ) is written as:

$$(M_\theta)\left\{\begin{array}{l}
\dot{x}_{\theta\ 1}(t) = -(2x_1(t)x_{0\ 2}(t) + \frac{u(t)}{\alpha_1})x_{\theta\ 1}(t)... \\
... - x_1^2(t),\ t > 0 \\
y_\theta(t) = y_{\theta\ 1}(t) = x_{\theta\ 1}(t),\ t > 0 \\
x_{\theta\ 1}(t) = 0,\ t = 0
\end{array}\right. \tag{13}$$

[1]This algorithm is implemented on the ODOE4OPE software: http://ODOE4OPE.univ-lyon1.fr Please contact the author for its use.

The constrained optimization problem for online optimization is here to find the optimal profile of input flow-rate $D(t)$ that maximizes the sensitivity $\frac{\partial C_a}{\partial k_v}(t)$ of the concentration ethyl acetate $C_a(t)$ with respect to the rate of reaction k_v. The problem $(COPI_I)$ given in (4) is written as (assuming that the control action is parametrized with a control horizon of 1):

$$\begin{cases} \max_{\tilde{D}} J(\tilde{D}) = \sum_{j=k+1}^{k+N_p} \left(\frac{\partial C_a}{\partial k_v}(j)\right)^2 \\ \tilde{D} = D(k) \end{cases} \tag{14}$$

where the control is always constrained in magnitude and velocity:

$$\begin{cases} 0 \ \text{mol.min}^{-1} \leqslant D(k) \leqslant 0.3 \ \text{mol.min}^{-1} \\ -0.03 \ \text{mol.min}^{-2} \leqslant \frac{D(k)-D(k-1)}{T_s} \leqslant +0.03 \ \text{mol.min}^{-2} \end{cases} \tag{15}$$

Moreover, the concentration of ethyl acetate inside the reactor may be limited in some cases:

$$C_a(.) \leqslant C_a^{max} = 0.015 \ \text{mol.l}^{-1} \tag{16}$$

Indeed, in order to see the influence of this output constraint (i.e., dealing with the possibility given to use the process) over the identification task, two cases are simulated:

- Case 1: the optimization of the sensitivity (14) is constrained by (15), and the process output behavior is free;
- Case 2: the optimization of the sensitivity (14) is also constrained by (15), but the process output is also constrained, by (16).

In order to solve this constrained optimization problem, the fmincon routine of Matlab[2] toolbox optimization is used: it is a sequential quadratic programming. The prediction horizon N_p is tuned to 10 and the sampling period $T_s = 1 \ min$. The volume of the reactor V is 100 l, the feed concentration C_{ain} is 1 mol.l^{-1}. The target value for k_v, used for the process simulation, is 4.73 l.mol^{-1}.min^{-1}. The initial conditions used for the process is $C_a(0) = 10^{-4}$ mol.l^{-1}, and for the model and the observer, 30 % of initial errors are set: $\hat{C}_a(0) = 0.7 \times 10^{-4}$ mol.l^{-1}, $\hat{k_v}(0) = 3.31$ l.mol^{-1}.min^{-1}. The simulation results show that, in term of maximization of the sensitivity of the output with respect to the sought parameter (Fig. 1), the need to satisfy the output constraint (16) in case 2 enforces the optimizer to reduce the value of the sensitivity obtained in case 1 (Fig. 2). This maximization is underlined on (Fig. 3), where the control action is always either saturated in magnitude or in velocity (case 1). But, in case 2, after having followed the same behavior obtained in case 1 (during the 5 first minutes), the magnitude of the control action decreases to reach a constant value (ca. 0.108 mol.min^{-1}, i.e. 36% of the full range). Indeed, the output constraint must be satisfied (Fig. 2) and is saturated after 30 minutes. At the same time, in both cases, the control applied to the simulated process and to the observer allows identifying the unknown constant parameter, in spite of the initial error of estimation of 30% (Fig. 4). The convergence with the target value is quiet similar in both cases, whereas case 2 allows to maintain the use of the process inside an enveloppe specified by the prescribed output constraint.

[2]www.mathworks.com

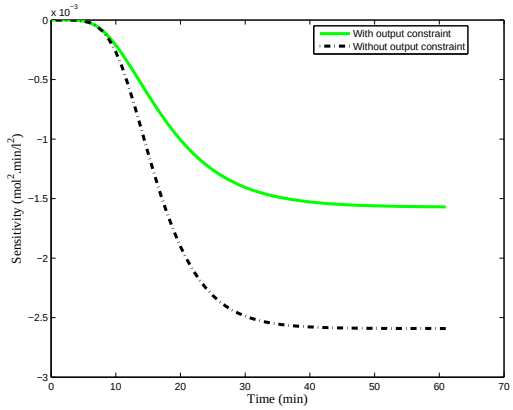

Fig. 1 Sensitivity of the concentration of ethyl acetate with respect to the reaction rate, in closed loop, with or without output constraint

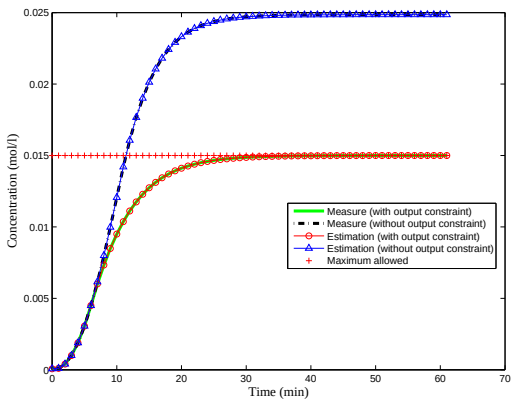

Fig. 2 Concentration of ethyl acetate, in closed loop, with or without output constraint

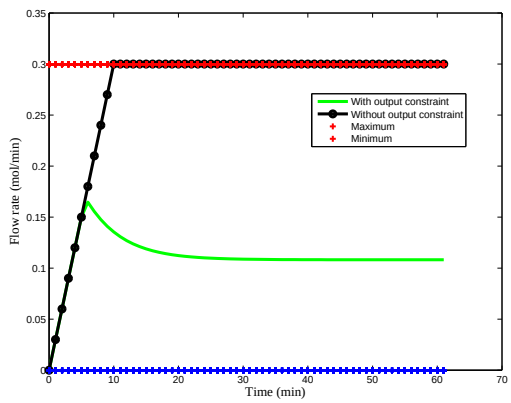

Fig. 3 Optimal input flow-rate, in closed loop, with or without output constraint

5 CONCLUSION

The main contribution of this paper was to provide a new approach for the optimal closed loop control for parameter identification, in the field of optimal design of experiments.

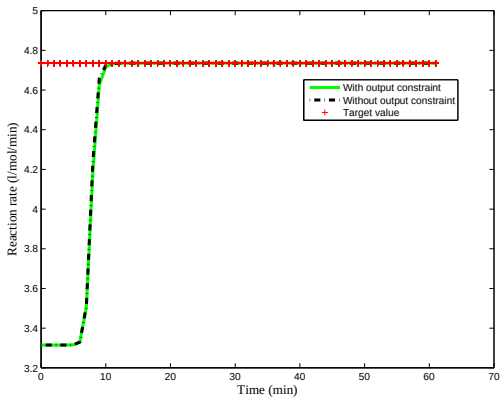

Fig. 4 Estimation of the reaction rate, in closed loop, with or without output constraint

The problem was to find the control to apply during the experiment that allowed optimizing a criteria which is a function of the sensitivity of the measured output with respect to the model parameter to estimate. This approach coupled a predictive controller and an observer that ensured, at the same time, both the control of the process according to the prescribed region of use and the online identification of the unknown model parameter. For the optimal control, an internal model based predictive control has been used. The online estimated parameter was fed into the control law to improve the closed loop performances. The two problems (optimal control and identification) were coupled, and solved at the same time, in a whole control problem. From the original process model, the dynamic sensitivity model was analytically defined. To keep the process behavior is a prescribed region, various constraints might be specified on the input, output and estimated states.

This approach may be applied on many cases, since it was presented in a general framework and that the main assumption dealt with the possibility to design an observer based on the model structure. There are many perspectives for this work, for example: the study and application of this approach for non uniformly observable systems, the multi variable approach, the study of the influence of output noise, the theoretical study of the stability of the closed loop approach and the theoretical study of the optimality of the solution for such controller.

REFERENCES

[1] Forssell U. and Ljung L. Closed-loop identification revisited[J]. *Automatica*, 1999, 35(7):1215-1241.

[2] Ljung L. *System Identification : Theory for the user*[M]. Prentice Hall, 1999.

[3] Bernaerts K. and Van Impe J.F. Optimal dynamic experiment design for estimation of microbial growth kinetics at sub-optimal temperatures: Modes of implementation[J]. *Simulation Modelling Practice and Theory*, 2005, 13(2):129-138.

[4] Rojas C.R., Welsh J.S., Goodwin G.C. and Feuer A. Robust optimal experiment design for system identification[J]. *Automatica*, 2007, 44(6):993-1008.

[5] Pronzato L. Optimal experimental design and some related control problem[J]. *Automatica*, 2008, 44(2):303-325.

[6] Besançon G. *Nonlinear observers and applications*[M]. Lecture Notes in Control and Information Science 363, Springer Verlag, 2007.

[7] Hammouri H., Bornard G. and Busawon K. High gain observer based on a structured nonlinear systems[J]. Accepted for publication under some minor corrections in *IEEE-Transactions on Automatic Control*.

[8] Versyck K.J., Bernaerts K., Geeraerd A.H. and Van Impe J.F. Introducing optimal experimental design in predictive modeling: A motiving example[J]. *International Journal of Food Microbiology*, 1999, 51: 39-51.

[9] Stigter J.D., Vries D. and Keesman K.J. On adaptative optimal input design[C]//. In Proceedings of the European Control Conference ECC, Cambridge, UK, 2003.

[10] Keesman K.J. and Stigter J.D. Optimal parametric sensitivity control for estimation of kinetic parameters in bioreactors[J]. *Mathematical Biosciences*, 2002, 179: 95-111.

[11] Qin S.J. and Badgwell T.A. A survey of industrial model predictive control technology[J]. *Control Engineering Practice*, 2003, 11: 733-764.

[12] Gauthier J.P, Hammouri H. and Othman S. A simple observer for non linear systems application to bioreactors[J]. *IEEE Transactions on Automatic Control*, 1992, 37: 875-880.

Mémoire d'HDR de Pascal Dufour, maître de conférences en section 61 du CNU, à l'Université Claude Bernard Lyon 1 (UCBL1), affecté au département Génie Electrique et des Procédés (GEP) de la Faculté des Sciences et Technologies (FST) et au Laboratoire d'Automatique et de Génie des Procédés (LAGEP), qui est l'UMR 5007 CNRS-UCBL1.