



HAL
open science

Supervision des processus chimiques à base de modèles Bond Graphs

Rafika El Harabi

► **To cite this version:**

Rafika El Harabi. Supervision des processus chimiques à base de modèles Bond Graphs. Automatique / Robotique. Université des sciences et technologies de Lille 1; Ecole nationale d'ingénieurs de Gabes, 2011. Français. NNT: . tel-01736566

HAL Id: tel-01736566

<https://hal.science/tel-01736566>

Submitted on 17 Mar 2018

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

Université Lille 1 (France)
École Doctorale EDSPI
École Polytechnique Universitaire de Lille

Ecole Nationale d'Ingénieurs de Gabès
École Doctorale SIS
Formation Doctorale en Génie Electrique
N° d'ordre : DOC.GE-10/11

THÈSE de DOCTORAT

Présentée pour l'obtention du titre de

Docteur de l'École Nationale d'Ingénieurs de Gabès
Spécialité Génie Electrique

Et

Docteur de l'Université Lille 1
Spécialité Automatique, Génie Informatique, Traitement du Signal et Images

Par

Rafika EL HARABI

Supervision des Processus Chimiques à Base de Modèles Bond Graphs

Soutenue le 09 Juillet 2011, devant le jury composé de :

M. Ridha BEN ABDENNOUR	Professeur à l'ENIG (Tunisie)	Président
M. Christophe AUBRUN	Professeur à l'UHP, Nancy (France)	Rapporteur
M. Nabil DERBEL	Professeur à l'ENIS (Tunisie)	Rapporteur
M. Dominique SAUTER	Professeur à l'UHP, Nancy (France)	Examineur
M. Belkacem OULD BOUAMAMA	Professeur à l'E. Polytech'Lille (France)	Directeur de thèse
M. Mohamed Naceur ABDELKRIM	Professeur à l'ENIG (Tunisie)	Directeur de thèse
Mme. Mireille BAYART	Professeur à l'E. Polytech'Lille (France)	Invitée

RESUME

Le travail de thèse proposé concerne la conception intégrée des algorithmes de surveillance des processus chimiques à base de modèles bond graph couplés. Cette recherche est réalisée dans le cadre de la thématique «Bond graphs pour la supervision des procédés énergétiques» développée entre l'Université de Gabès (Tunisie) et l'Ecole Polytechnique Universitaire de Lille (France).

L'outil bond graph par son caractère unifié et multidisciplinaire, utilisé pour la surveillance et le diagnostic du processus chimique, incorpore la cinétique chimique des différents phénomènes d'une réaction équilibrée (de la chaleur et de transport de masse). La stratégie de diagnostic à base de modèle Bond graph est adaptée pour détecter et localiser les défauts cinétiques et thermodynamiques dus à l'apparition des événements secondaires dans un réacteur chimique.

En outre, les propriétés causales et structurales du modèle bond graph sont utilisés non seulement pour la simulation de dynamique de système mais également pour la conception des algorithmes de détection et d'isolement de défaut (FDI) (c-à-d la génération des indicateurs de défaut formels) pour la surveillance en ligne des défauts capteurs, actionneurs et des phénomènes physico-chimiques et déterminer ainsi les conditions de surveillabilité structurelle des équipements pertinents sans calcul numérique. Le modèle Bond Graph à paramètre incertain sous forme des transformations linéaires fractionnaires (BG-LFT) développé, capable d'être exploité pour développer des générateurs dynamiques de seuil et achever la robustesse par rapport aux incertitudes de modèle en combinaison avec la sensibilité aux défauts.

Mots clés : *Bond Graph Couplé, Analyse Structurelle, Redondance Analytique, Modèle BG-LFT Incertain, Réacteur Chimique, Défaillance Physique.*

ABSTRACT

This thesis treats the problems relative to the integrated design of the monitoring algorithms for chemical processes based on coupled Bond Graph models. This research is carried out within the framework of the set of themes «Bond graph tool for the supervision of the energy processes» developed between the University of Gabès (Tunisia) and the University Polytechnic school of Lille (France).

The bond graph model as unified and multidisciplinary tool, used for supervision and diagnosis of chemical process, incorporates the chemical kinetics of an equilibrated reaction, heat and mass transport phenomena. A bond graph model based diagnostic strategy, is adopted to detect and isolate kinetic and thermodynamic drift of chemical reactors due to appearance of secondary reactions. Furthermore, the causal and structural properties of the bond graph model are used not only for system dynamics simulation but also to design Fault Detection and Isolation (FDI) algorithms (i.e. the generation of formal fault indicators) for online supervision of faults affecting sensors, actuators, physico-chemical components and phenomena and determine the conditions of structural surveillability of the relevant equipment without numerical calculation. The methodology using a Bond Graph representation in linear fractional transformation (LFT) form is shown to be a valuable tool for developing dynamic threshold generators and achieving robustness against model uncertainty in combination with sensitivity to faults.

Key words: *Coupled Bond Graph, Structural Analysis, Analytical Redundancy, Uncertain BG-LFT Model, Chemical Reactor, Physical Failure.*

Table des matières

Dédicace	vi
Remerciement	vii
Table des figures	1
Liste des tableaux	5
Introduction Générale	6
1 Etat de l'art sur le diagnostic des processus chimiques	17
1.1 Introduction	17
1.2 Principe de la surveillance	20
1.3 Différentes méthodes de surveillance des procédés chimiques	22
1.3.1 Méthodes à base d'un modèle	22
1.3.1.1 Estimation de l'état	24
1.3.1.2 Estimation paramétrique	27
1.3.1.3 Espace de parité	29
1.3.1.4 Modèles Causaux	29
1.3.1.5 Modèles hiérarchiques	33
1.3.2 Méthodes à partir des données historiques	33
1.3.2.1 Approches statistiques	33
1.3.2.2 Réseaux de neurones artificiels (RNA)	35
1.3.2.3 Reconnaissance de formes	37
1.3.2.4 Système expert	38
1.3.3 Méthodes de prévention des risques	40
1.3.3.1 Methodologies d'analyse des risques	41
1.3.3.2 Méthodes expérimentales d'évaluation des risques	46
1.4 Analyse Structurale pour la surveillance robuste des systèmes réactifs	47

1.4.1	Analyse Structurale	47
1.4.2	Structure d'un système comme un graphe bi-partite	50
1.5	Diagnostic robuste des processus chimiques	51
1.5.1	Méthodes robustes à base de modèles	51
1.5.2	Bond Graph pour le diagnostic robuste des processus chimiques	54
1.6	Conclusion	56
2	Modèles Bond Graphs couplés incertains des processus chimiques	57
2.1	Introduction	57
2.2	Modèles bond graphs multiénergies	59
2.2.1	Représentation des bond graphs à énergies couplées	59
2.2.2	Structure d'un modèle bond graph couplé	63
2.3	Classification de procédés thermochimiques	64
2.3.1	Critères de classifications	64
2.3.1.1	Mode de fonctionnement du réacteur	64
2.3.1.2	Mode d'activation de la réaction	65
2.3.2	Classification de procédés thermochimiques	65
2.4	Modèles Bond Graph déterministes des systèmes réactifs	66
2.4.1	Modélisation des réactions chimiques	66
2.4.1.1	Modélisation de la cinétique chimique	67
2.4.1.2	Modélisation de la thermodynamique chimique	76
2.4.1.3	Modélisation du phénomène de diffusion	78
2.4.1.4	Modélisation du phénomène électrochimique	81
2.4.1.5	Modélisation des réactions secondaires	85
2.4.2	Modélisation des réacteurs chimiques	88
2.4.3	Cas général: Bilan d'espèce	90
2.4.4	Cas particulier: Réacteur Continu Parfaitement Agité (CSTR)	92
2.4.4.1	Bilan de chaleur	92
2.4.4.2	Bilan de masse	95
2.4.5	Echangeur de chaleur	96
2.5	Modèles Bond Graph incertains des composants et phénomènes chimiques	97
2.5.1	Modélisation LFT des éléments Bond Graph	98
2.5.1.1	Représentation des systèmes incertains sous forme LFT	98
2.5.1.2	Modélisation des éléments BG incertains	99
2.5.1.3	Effet de type d'incertitudes	100
2.5.1.4	Construction d'un modèle BG-LFT	102

2.5.1.5	Exemple pédagogique: système hydraulique	102
2.5.2	Présence d'incertitude dans les systèmes chimiques	105
2.5.3	Construction d'un modèle BG-LFT des éléments d'une réaction chimique	106
2.5.3.1	Modèle BG-LFT d'élément R simple	107
2.5.3.2	Modèle BG-LFT du Multiport \mathbb{R}	108
2.5.3.3	Modèle BG-LFT d'élément C	109
2.5.3.4	Modèles BG-LFT des éléments TF	110
2.6	Application à un système chimique	112
2.6.1	Description du procédé	112
2.6.2	Modélisation BG-LFT	113
2.6.2.1	Bond graph à mots	113
2.6.2.2	Modèle Bond graph	113
2.7	Conclusion	116
3	Génération des Algorithmes de Surveillance Robustes	118
3.1	Introduction	118
3.2	Types de défauts dans un réacteur chimique	119
3.2.1	Défauts actionneurs	119
3.2.2	Défauts capteurs	120
3.2.3	Défauts systèmes	121
3.3	Génération de RRAs déterministes des systèmes réactifs	123
3.3.1	Structure d'un système de surveillance	124
3.3.1.1	Représentation structurelle d'un système de surveillance	124
3.3.1.2	Représentation structurelle par bond graph	126
3.3.1.3	Propriétés causales des bond graphs à énergies couplées	127
3.3.2	Génération de RRAs en utilisant le graphe biparti	131
3.3.3	Parcours des chemins causaux	132
3.3.4	Génération de RRAs en utilisant le bond graph	134
3.3.5	Algorithme de génération des RRAs du système chimique	135
3.3.6	RRAs sensibles aux défaillances physiques	138
3.3.6.1	RRAs sensibles aux défaillances de type apparition des réactions secondaires	138
3.3.6.2	RRAs sensibles aux défaillances de type fuite	140
3.3.6.3	RRAs sensibles aux défaillances de type bouchage	142
3.3.6.4	RRAs sensibles aux défaillances des régulateurs	142
3.3.6.5	RRAs sensibles aux défaillances des sources contrôlées	143

3.3.7	Matrice des signatures de fautes	143
3.3.8	Problématique de la localisation de défaillances	144
3.3.9	Procédures de décisions	144
3.3.9.1	Procédures statistiques de décision	144
3.4	Génération de résidus robustes par Bond Graph couplé	145
3.4.1	Forme générale de la RRA incertaine	146
3.4.2	Génération des seuils adaptatifs	147
3.4.3	Exemple	147
3.4.4	Analyse de la sensibilité	150
3.4.4.1	Sensibilité absolue S_a (calcul d'incertitude absolue)	152
3.4.4.2	Sensibilité relative S_r (calcul d'incertitude relative)	153
3.5	Exemple illustratif: cas d'emballlement thermique	153
3.5.1	Phénomène d'emballlement et apparition des réactions secondaires	153
3.5.2	Description synthétique d'emballlement thermique	154
3.5.2.1	Réaction de synthèse	155
3.5.2.2	Réaction de décomposition	157
3.5.3	Génération des Relations de Redondance Analytique	158
3.5.3.1	Génération des RRAs déterministes	159
3.5.3.2	Génération des RRAs robustes	160
3.5.3.3	Analyse de la surveillabilité	162
3.5.3.4	Procédures statistiques de décision	162
3.6	Conclusion	164
4	Informatisation des procédures de génération des algorithmes de surveillance	165
4.1	Introduction	165
4.2	État de l'art des logiciels existants	166
4.2.1	Logiciels de modélisation	166
4.2.2	Logiciels du diagnostic	169
4.3	Implémentation de la boîte à outils	171
4.3.1	Conception des bibliothèques de modèles pour les composantes chimiques	171
4.4	Conclusion	173
5	Application à une installation d'estérification	174
5.1	Introduction	174
5.2	Etude de l'installation chimique	174
5.2.1	Fonctionnement de l'unité	176

5.2.2	Description de dispositifs	177
5.2.3	Aspect thermodynamique et cinétique de la réaction	179
5.2.4	Problématique	180
5.3	Modélisation du réacteur chimique	181
5.3.1	Bond graph à mots du système	181
5.3.1.1	Hypothèses de modélisation	181
5.3.1.2	Variables de puissance utilisés	182
5.3.2	Modèle Pseudo Bond Graph global	183
5.3.2.1	Système d'alimentation (Ampoule de coulée)	183
5.3.2.2	Cuve de réacteur	184
5.3.2.3	Modèle des vannes	186
5.3.2.4	Modèle de la réaction chimique	186
5.3.2.5	Pertes thermiques	188
5.3.2.6	Caloporteur et système de refroidissement	189
5.3.3	Simulation et validation du modèle	191
5.3.3.1	Modèle dynamique et sa validation	191
5.4	Conception du système de surveillance	199
5.4.1	Cahier des charges	199
5.4.2	Générations des Relations de Redondance Analytique (RRAs)	200
5.4.3	Analyse de la surveillabilité de l'installation	203
5.4.3.1	Signature des pannes	203
5.4.3.2	Distance du Hamming	204
5.4.4	Résultats de simulation	204
5.4.4.1	Fonctionnement normal des résidus	204
5.4.4.2	Scénarios de défaillances capteurs	207
5.4.4.3	Défaillances physiques sur le réacteur chimique	208
5.5	Conclusion	211
Conclusion générale et perspectives		212
1	Conclusion	212
2	Perspectives	215
Bibliographie		217

Dédicace

A l'âme de ma mère,
A mes parents,
A mes frères et mes sœurs,
A mon cher fiancé
en témoignage de reconnaissance et d'affection.
A tous ceux qui me sont chers.

“Ne pas rire, ni haïr, ni se lamenter mais comprendre...”

Spinoza

Remerciement

Je voudrais, d'abord, exprimer ma reconnaissance à l'Ambassade de la France en Tunisie et à l'Institut Français de Coopération en Tunisie et particulièrement le Service de coopération et d'action culturelle qui m'a attribué une bourse d'étude du gouvernement français dans le cadre de la préparation de ma thèse en cotutelle entre l'Université des Sciences et Technologies de Lille et l'Ecole Nationale d'Ingénieurs de Gabès. Cette bourse m'a permis d'une part la réalisation de mes travaux de recherches et d'autre part de participer aux activités culturelles proposées par le CROUS en France. Je tiens tout particulièrement à remercier Madame Imen ANNABI, responsable des bourses d'études et relations avec les anciens boursiers en Tunisie et Madame Danielle FABIS, du Service International de CROUS Lille.

*Je remercie vivement, bien entendu, Monsieur le Professeur **Belkacem OULD BOUAMAMA**, Directeur de recherche à l'Ecole Polytechnique Universitaire de Lille et responsable de l'équipe Méthodes et Outils pour la Conception Intégrée des Systèmes (MOCIS), de m'accueillir tout d'abord au sein du Laboratoire d'Automatique et Génie Informatique et Signal (LAGIS) et d'avoir dirigé efficacement mes travaux de recherche. Monsieur OULD BOUAMAMA a suscité mon intérêt à la surveillance des procédés chimiques à l'aide de l'outil Bond Graph en complément de ses multiples conseils ainsi que sa disponibilité afin de résoudre les problèmes les plus délicats à travers son attitude posée, ce qui a adouci le chemin rugueux à mon égard. Ces conseils judicieux, la confiance et le soutien qu'il m'a accordé ont été primordiaux à l'aboutissement de ces résultats durant toute la durée de ce travail de recherche.*

*Je remercie également le Professeur **Mohamed Naceur ABDELKRIM**, Directeur de l'Ecole Nationale d'Ingénieurs de Gabès, et Directeur de l'Unité de Recherche Modélisation, Analyse et Commande des Systèmes (MACS) pour m'avoir permis d'effectuer ces travaux en France, pour tous ses conseils avisés et ses encouragements, sa confiance et le soutien qu'il m'a accordé afin de mener à bien ce travail.*

*J'exprime ma profonde gratitude à Monsieur **Ridha BEN ABDENNOUR**, Professeur à l'Ecole Nationale d'Ingénieurs de Gabès, pour l'honneur qu'il nous a fait en acceptant de présider le jury de cette thèse.*

*Tous mes remerciements s'adressent à Monsieur **Christophe AUBRUN** Professeur à l'Université Henri Poincaré de Nancy et Monsieur **Nabil DERBEL** Professeur à l'Ecole*

Nationale d'Ingenieurs de Sfax pour m'avoir fait l'honneur de rapporter ce travail de thèse.

*Je remercie Monsieur **Dominique SAUTER**, Professeur à l'Université Henri Poincaré de Nancy pour m'avoir fait l'honneur d'examiner ce travail de thèse.*

*Je remercie Madame **Mireille BAYART**, Professeur à l'Ecole Universitaire Polytechnique de Lille, d'avoir accepté de juger mes travaux de thèse.*

J'adresse mes sincères remerciements à Madame Geneviève DAUPHIN TANGUY, Professeur à l'Ecole Centrale de Lille et membre permanent de l'équipe Méthodes et Outils pour la Conception Intégrée des Systèmes du LAGIS, pour nous avoir soutenu tout au long de ces trois années. Qu'elle trouve ici notre profonde amitié pour la bienveillance et la gentillesse qu'elle nous a toujours témoignées.

Je remercie chaleureusement Monsieur Mohamed KONI BEN GAYED, Maître Assistant à l'Institut Supérieur des Etudes Technologiques de Gabès (ISETG), pour le grand soin et intérêt qu'il a porté à mon sujet de thèse sans oublier sa disponibilité et son aide.

Mes remerciements vont aussi aux membres des équipes Méthodes et Outils pour la Conception Intégrée des Systèmes (MOCIS) et Systèmes Tolérants aux Fautes (STF) en France et aux membres de l'Unité de Recherche MACS en Tunisie.

Je profite de cette occasion qui m'est offerte pour remercier toutes les personnes que j'ai rencontrées durant ces années de thèse pour l'aide et la sympathie qu'elles m'ont témoignée pour mon intégration au laboratoire.

Enfin, toute ma gratitude pour toute ma famille qui m'a accompagnée tout au long de mes études par son amour inconditionnel et son soutien constant.

Table des figures

1.1	Schéma de principe de la méthode de surveillance.	19
1.2	Classification des méthodes de diagnostic	20
1.3	Surveillance des processus chimiques	21
1.4	Etapas de détection et isolation des fautes	21
1.5	Architecture générale de la détection de défauts à base de modèles	23
1.6	Principe général de génération de résidu à l'aide d'un estimateur.	24
1.7	Principe de l'approche par estimation paramétrique.	28
1.8	Exemple d'un SDG issu du comportement d'une voiture.	31
1.9	Définitions du lien du graphe signé orienté (a) : si x_j augmente x_i diminue.(b) : si le x_j augmente x_i ne change pas brusquement le sens, mais il diminue gra- duellement.	31
1.10	Architecture d'un système expert.	40
1.11	Organigramme de la procédure de l'examen HAZOP.	46
2.1	Représentation des bond graphs à énergies couplées	60
2.2	Transfert thermique dans une réaction chimique.	61
2.3	Choix des variables de liaison pour le phénomène de conduction. (a) schéma de principe (b) utilisation d'une résistance modulée pour la paire (T, \dot{S}) (c) utilisation d'une simple résistance pour la paire (T, \dot{Q})	62
2.4	Couplage hydrauthermique	63
2.5	Représentation vectorielle d'un BG multiénergie	63
2.6	Différents composants des classes de procédés thermochimiques	66
2.7	Représentation de la résistance chimique. (a) près de l'équilibre (b) loin de l'équilibre	70
2.8	Modèle bond graph d'un système réactif (a) avec élément simple de résistance chimique modulée. (b) avec élément multiport de résistance chimique.	70
2.9	Element \mathbb{C} multiport thermofluide d'un système chimique à masse variable.	71
2.10	(a) Multiport \mathbb{C} accumulant l'énergie libre de Gibbs G . (b) Multiport accumu- lant l'énergie libre de Gibbs G où T, P sont constantes.	72

2.11	Modèle Bond Graph d'une réaction chimique près de l'équilibre	72
2.12	Calcul des débits molaire dans le cas d'un mélange	73
2.13	Modèle bond graph du demultiplexeur chimique d'un mélange	73
2.14	Schéma d'un réacteur chimique alimenté par un mélange de p constituants . .	74
2.15	Découplage de différentes énergies	75
2.16	Modèle Bond Graph avec le couplage de trois énergies dans une réaction chimique	76
2.17	Modèle bond graph global de la réaction chimique en tenant compte des phénomènes thermodynamiques.	77
2.18	Phénomène de transport de matière: diffusion/ migration	79
2.19	Modélisation de phénomène de diffusion dans une réaction chimique	80
2.20	Pile à combustible PEM	82
2.21	Modèle bond graph détaillé de cathode	84
2.22	Modèle Bond Graph d'une réaction parallèle.	87
2.23	Modèle Bond Graph d'une réaction en chaines ramifiées.	88
2.24	Modèle Bond Graph de CSTR de <i>P. Breedveld (2006) [1]</i>	89
2.25	Modèle pseudo bond graph d'un CSTR.	90
2.26	Schéma général d'un réacteur homogène en domaine chimique	91
2.27	Modèle bond graph général d'un réacteur homogène en domaine chimique . .	91
2.28	Shéma de principe d'un réacteur continu	92
2.29	Modèle pseudo bond graph d'un réacteur homogène continu en domaine thermique.	95
2.30	Modèle pseudo bond graph générique d'un réacteur homogène continu en domaine hydraulique.	96
2.31	Modèle Bond Graph de l'échangeur de chaleur (a) schéma de principe (b) Modélisation	97
2.32	Représentation LFT	99
2.33	(a) Élément C en causalité intégrale avec incertitude additive. (b) Élément C en causalité dérivée avec incertitude additive.	101
2.34	(a) Élément I en causalité intégrale avec incertitude additive. (b) Élément I en causalité dérivée avec incertitude additive.	101
2.35	Représentation d'un BG-LFT	102
2.36	(a) Exemple pédagogique: système hydraulique. (b) Modèle BG déterministe en causalité intégrale.	103
2.37	Modèle BG-LFT en causalité intégrale du système hydraulique.	104
2.38	Modèle de dissipation de l'énergie dans une réaction chimique	107

2.39	(a) Modèle BG-LFT d'un élément R en causalité résistance avec incertitude multiplicative.(b) Modèle BG-LFT d'un élément R en causalité conductance avec incertitude multiplicative.	108
2.40	Multiport incertain \mathbb{R} sous forme LFT (a) en causalité résistance avec incertitude multiplicative. (b) en causalité conductance avec incertitude multiplicative	109
2.41	(a) Élément C en causalité dérivée. (b) Élément C en causalité intégrale . . .	110
2.42	Élément TF avec les deux types de causalité.	111
2.43	Schéma technologique du processus	112
2.44	Bond Graph à mots du réacteur chimique	113
2.45	Modèle BG déterministe en causalité intégral du domaine chimique de la réaction	114
2.46	Modèle BG-LFT en causalité intégrale de la réaction chimique	116
3.1	Défauts dans une installation chimique: cas d'un réacteur	119
3.2	Représentation bond graph d'un système de surveillance	124
3.3	(a) Système d'échange de puissance. (b) Modèle Bond Graph en causalité dérivée	128
3.4	Graphe orienté menant à la génération des RRAs	129
3.5	Chemin causal généralisé dans les modèles bond graphs à énergies couplées en causalité intégrale	130
3.6	(a) Modèle Bond Graph du système hydraulique (b) Chemin causal	130
3.7	(a) Graphe Bipartite (b) Matrice d'incidence déduite à partir du Bond Graph.	131
3.8	Modèle bond graph multiénergie	133
3.9	Système hydraulique illustratif: (a) schéma de principe (b) modèle bond graph en causalité intégrale (partie hydraulique)	135
3.10	Graphe orienté pour la surveillance	136
3.11	Modèle bond graph en causalité dérivée par dualisation des détecteurs	136
3.12	Graphe orienté équivalent à la première RRA.	137
3.13	Shéma général d'un réacteur en domaine chimique.	138
3.14	Bond graph d'une réaction chimique	139
3.15	Représentation bond graph incertain d'un système de surveillance robuste . . .	146
3.16	Schéma du système hydraulique et son modèle bond graph en causalité intégrale	148
3.17	Modèle bond graph LFT du système en causalité dérivée	148
3.18	Représentation schématique d'un scénario de perte totale de refroidissement dans un réacteur fermé discontinu.	155
3.19	Modèle BG déterministe en causalité dérivée de la réaction chimique	159
3.20	Modèle BG-LFT en causalité dérivée de la réaction chimique	161
4.1	Interface graphique de la partie BondPad du logiciel SYMBOLS 2000	168
4.2	Architecture du générateur de modèles en génie des procédés pour leur diagnostic	170

4.3	Bibliothèque de capsules des réacteurs et des réactions chimiques	172
4.4	Modèle interne de la capsule d'une réaction chimique	173
5.1	Vue générale de l'installation chimique	175
5.2	Vue générale de l'installation chimique	176
5.3	Schéma technologique de l'unité d'estérification	177
5.4	Schéma technologique de la partie étudiée de l'unité d'estérification	179
5.5	Bond graph à mots de l'installation chimique	182
5.6	Bond graph à mots détaillé de la partie étudiée	183
5.7	Modèle Pseudo bond graph de l'ampoule de coulée	184
5.8	Modèle Bond Graph du réacteur avec son environnement	185
5.9	Modèle Bond Graph de la réaction chimique	187
5.10	Modèle Bond Graph des pertes thermiques	189
5.11	Modèle bond graph du caloporteur et système de refroidissement	190
5.12	Variation des concentrations de différents composants de la réaction	192
5.13	Schéma de validation du modèle	193
5.14	Validation du modèle de la réaction chimique en utilisant Symbols	193
5.15	Evolution des concentrations d'acide et d'alcool	194
5.16	Evolution des concentrations d'ester et d'eau	194
5.17	Interface de simulation montrant les courbes d'évolution des concentrations des réactifs et des produits	195
5.18	Comparaison entre les résultats de simulation et expérimentaux pour (a) les concentrations des réactifs et (b) les concentrations des produits	196
5.19	Evolution de la fraction molaire pratique et simulée	197
5.20	Comparaison entre les résultats de simulation et expérimentaux pour la fraction molaire	198
5.21	Représentation d'état générée automatiquement par le logiciel Symbols	198
5.22	Liste des paramètres utilisés dans le modèle Bond Graph	199
5.23	Bond graph (a) et graphe orienté de servo-vanne.	202
5.24	Réponse des résidus lors du fonctionnement normale	207
5.25	Réponse des résidus cas défaut au niveau capteur de température	208
5.26	Réponse des résidus à la fuite	208
5.27	Réponse des résidus en cas de défaut dans le caloporteur	209
5.28	Réponse des résidus à l'apparition des réactions secondaires.	210

Liste des tableaux

3.1	Signature de fautes physiques pour un accumulateur	141
3.2	Matrice des signatures des fautes	143
3.3	Signature de fautes	163
5.1	Matrice de signature de fautes du système de surveillance de l'installation . .	205
5.2	Distance du Hamming	206

Introduction Générale

Cadre de la thèse

Les travaux développés dans ce mémoire ont été effectués au Laboratoire d'Automatique, Génie Informatique et Signal (LAGIS-France), FRE CNRS 3303, au sein de l'opération transversale « Bond Graph et surveillance » sous la direction de Professeur Belkacem OULD BOUAMAMA et à l'Unité de Recherche Modélisation, Analyse et Commande des Systèmes (MACS-Tunisie) (06/UR/11-12) sous la direction de Professeur Mohamed Naceur ABDELKRIM, dans le cadre d'une thèse en cotutelle entre l'Ecole Polytechnique Universitaire de Lille et l'Ecole Nationale d'Ingénieurs de Gabès.

Ce travail de recherche a été réalisé dans le cadre de la thématique « Les Bond graphs pour la supervision des procédés énergétiques » développée au sein du laboratoire LAGIS. Cette thématique développée dans ce groupe de travail utilise les contributions des équipes: Systèmes Tolérants aux Fautes (STF) et Méthodes et Outils pour la Conception Intégrée des Systèmes (MOCIS) pour la détection et l'isolation des défauts (*en anglais FDI: Fault Detection and Isolation*) en utilisant un outil fédérateur, les Bond Graphs. Les travaux de cette opération transversale (mise en place en 1998) ont fait l'objet de plusieurs publications (cf-<http://rimbaut.univ-lille1.fr/twiki/bin/view/Main/BelkacemBouamama>). La synthèse des résultats de ces travaux est diffusée dans l'ouvrage de *A.K. Samantaray & B. Ould-Bouamama (2008)* [2] et finalisée par un logiciel de génération d'algorithmes de surveillance et d'analyse par un placement des capteurs optimaux (au sein de surveillabilité structurelle) *B. Ould-Bouamama & al. (2006)* [3].

Toutefois les travaux réalisés concernent uniquement des modèles Bond Graph couplés avec deux types d'énergie (fluidique et thermique). Le diagnostic des processus chimiques introduisant une complexité supplémentaire due aux phénomènes de transformation de la matière reste une problématique posée. C'est justement dans ce cadre qu'est développée la présente recherche en collaboration avec le laboratoire MACS en Tunisie pour la sécurité et la protection des industries chimiques de Gabès en Tunisie [4]. Ces zones assurent la production de l'acide phosphorique et d'acide sulfurique à partir du phosphate pur venant des mines de Gafsa et assurent aussi la fabrication de d'acide phosphorique et d'engrais et des détergents. Elles utilisent des procédés complexes de grande dimension, difficiles à

manipuler telles que les installations des réacteurs des différents types batch, continu ou tubulaire. Dans ce contexte, la sécurité est devenue une préoccupation essentielle dans le Groupe Chimique Tunisien afin d'éviter, par exemple, l'émission de produits toxiques ou inflammables dans l'environnement qui peut être coûteux en vies humaines et néfaste pour l'environnement et l'économie. Le travail de recherche est orienté vers la protection et la sécurité des réacteurs chimiques et la réduction des impacts de l'activité industrielle sur l'environnement. On s'intéresse particulièrement à la sécurité du réacteur, l'état thermique, les réactions chimiques et l'apparition des réactions secondaires parasites, sources de pollution ou même d'explosion.

Concrètement, l'objectif de cette thèse est la conception des algorithmes robustes de surveillance des processus chimiques à base de modèles incertains en utilisant un seul outil: le bond graph couplé avec trois formes d'énergie (fluidique, thermique et chimique). Une attention particulière sera accordée à la détection et la localisation de défauts de type chimique principalement l'apparition de réactions secondaires et l'emballement de la réaction. Sur le plan méthodologique, le travail consiste à automatiser les procédures de génération de modèles et d'indicateurs de défaillances sous forme formelle pour les intégrer dans le système de supervision et une proposition de placement de capteurs pour satisfaire le cahier de charges avant conception du système. Sur le plan industriel, les résultats obtenus seront appliqués sur un processus pilote (unité d'estérification) qui se trouve à l'Ecole Nationale d'Ingénieurs de Gabès (dans le hall de génie de procédés) en Tunisie. Je tiens à remercier le département de génie des procédés pour avoir mis à ma disposition ce processus pour l'expérimentation.

Positionnement du travail de thèse

L'industrie chimique représente un secteur très important dans l'économie des plusieurs pays. Elle est chargée de réaliser des transformations chimiques dont le but de produire des nouvelles matières ou bien de modifier leurs caractéristiques (augmentation de la pureté, changement de caractéristiques thermodynamiques...etc.).

La transformation chimique reste une opération complexe dangereuse et polluante, et la chaîne de production dans ce type de fabrication contient divers procédés de différentes dimensions (chaudières, vannes, pompes, ballons, colonnes...). Dans ce sens, l'amélioration de la qualité, de la productivité ainsi que la réduction des coûts sont l'objet d'une demande croissante de la part des industriels, en particulier pour l'exploitation des systèmes automatisés dont la complexité est croissante.

Cependant, il arrive souvent que ces systèmes perdent certains degrés de performances lors de l'apparition des anomalies, défauts, ou dysfonctionnement ce qui augmente le temps d'indisponibilité des procédés. De plus, des statistiques industrielles ont montré que les petits défauts fréquents tous les jours, occasionnent des pertes économiques importantes (fuites, arrêts inutiles des installations ...), *A. Orantes & al. (2008) [5]*. Ces pertes sont encore plus

élevées dans le cas des industries pharmaceutiques et chimiques.

Aujourd'hui en raison, d'une part, des contraintes économiques de compétitivité accentuées par la mondialisation et, d'autre part, de la sûreté de fonctionnement, le diagnostic a pleinement conquis sa place surtout pour les processus en génie des procédés en raison de leur caractère à risque (processus chimique, nucléaire...etc). Le souci de la protection de l'environnement est aussi une raison supplémentaire de l'importance du diagnostic de ce type de procédé. En effet, en Mars 2011, depuis le fort séisme et le tsunami qui l'a suivi, un drame nucléaire (accident nucléaire de niveau 6) a attaqué la centrale nucléaire de Fukushima-Daiichi au nord-est du Japon. L'explosion du premier réacteur été causée par l'hydrogène, c'est une explosion mécanique qui a soufflé le réacteur (la fusion a été partielle). Une deuxième explosion a retenti dans le réacteur deux où les opérations d'injection d'eau de mer avaient repris pour tenter de refroidir les barres de combustible. La situation s'est aggravée puisque une troisième explosion est survenue dans un réservoir (réacteur numéro trois) de carburant d'une centrale thermique. Cette explosion d'hydrogène a en outre déclenché un incendie dans le réacteur numéro quatre, qui était à l'arrêt pour maintenance lorsque le séisme s'est produit. Un bassin de stockage de combustible nucléaire usagé a été touché par les flammes. Ces explosions ont engendré des fuites radioactives et le niveau de radioactivité autour des réacteurs est dangereux pour la santé pour cela les personnes habitant dans un rayon de 40 km autour de la centrale à demeurer confinées chez elles. Ces dernières années d'autre graves accidents sont survenus dans ce type de procédés: AZDF de Toulouse, Union Carbide's Bhopal en Inde, l'explosion à la raffinerie pétrochimique Mina Ahmedhi au Koweït causant des pertes de l'ordre de 400 millions de dollars *F.P. Less. (1996)* [6], mais surtout la mort de nombreuses personnes. Alors, la gestion des risques et la gestion des situations des alarmes sont toutes les deux concernées par les questions de sûreté de fonctionnement. La première concerne le diagnostic des origines des fautes alors que la deuxième concerne l'analyse des conséquences des fautes. La mise en place des procédures de détection et de diagnostic des fautes constitue une étape primordiale dans le développement des systèmes de supervision.

Les phénomènes chimiques introduisent une complexité supplémentaire aux procédés énergétiques par l'adjonction des phénomènes de transformation de la matière. Le couplage des trois type de puissance : fluide, thermodynamique et chimique caractérise la complexité des procédés traités dans le présent mémoire. Le diagnostic des réacteurs chimiques est une tâche difficile. Cela est dû à plusieurs facteurs tels que les conditions de fonctionnement du régime transitoire, les perturbations incertaines et l'évolution non linéaire de ces variables d'état. En outre, ces processus manipulent des réactifs qui peuvent être instables thermiquement et souffrent de variation de charge initiale et impureté des concentrations.

Plusieurs travaux ont été réalisés dans la littérature pour développer des méthodes de diagnostic des procédés chimiques, se basant sur les différentes informations disponibles pour

décrire le comportement des systèmes. Deux types de méthodes sont utilisés, les méthodes à base du modèle et les méthodes sans modèle analytique.

Les méthodes utilisant des modèles opératoires font appel à des procédures d'apprentissage et de reconnaissance de formes ou à l'intelligence artificielle. Ces approches qualitatives analysent des données fournies par les processus chimiques et elles essayent de les répartir en plusieurs classes correspondant à des modes de fonctionnement connus, puis de déterminer par apprentissage les relations mathématiques entre les effets (observations des experts, mesures de capteurs et données statistiques), et les causes (les défauts). Cette approche a fait l'objet de plusieurs publications ces dernières années, telles que: *E.M. Assaf & al. (1996)* [7] qui utilisent les réseaux de neurones pour modéliser des situations possibles d'emballage thermique du processus fortement exothermique et développer un algorithme fiable d'alarme pour la détection et la prévention rapide des risques à l'aide des méthodes statistiques. *J.C. Hoskins & al. (1988)* [8] établissent une classification des causes thermiques d'emballage dans les réacteurs de polymérisation à base des fonctions radiales pour décrire les relations de causes à effets, ainsi que les algorithmes génétiques pour optimiser le choix des paramètres des réseaux de neurones. A partir de ces approches, il n'est généralement pas possible d'identifier tous les modes de fonctionnement possibles du système (mode normal et défaillant), à cause de la nécessité d'une base de données riche en information et l'indisponibilité ou l'absence du procédé réel pour attribuer et tester les cas de défaillance. La théorie floue a été utilisée par des méthodes d'identification de risque (HAZOP, Dylam). Ces règles logiques posent le problème d'explosion combinatoire des règles ce qui mène à un conflit suivi d'une mauvaise détermination des conditions dangereuses de dérivation.

Les méthodes d'analyse de risque et les méthodes empiriques sont les plus fréquemment appliquées dans l'industrie. Ces méthodes expérimentales ne permettent pas un suivi temps réel de l'évolution des paramètres des systèmes, ce sont des méthodes hors ligne. Elles permettent d'analyser les causes et les conséquences des défauts sur un arbre de défaillance et déterminer ainsi les composants défaillants. Afin de détecter et isoler des défauts physiques (aussi bien de composants que des phénomènes) sans avoir recours à des procédures d'apprentissage (difficile à mettre en œuvre dans un processus réel), les méthodes à base de modèles sont bien adaptées.

Les travaux présentés dans ce mémoire se situent dans le domaine des méthodes à base de modèle pour la surveillance des processus chimiques en utilisant un outil unique: les bond graphs et l'objectif de la démarche développée est de générer des résidus sensibles aux défaillances physiques liés à des phénomènes chimiques (apparition des réactions secondaires, des gaz toxiques, inflammation, amorçage de réactions secondaires donnant lieu à un emballage thermique et explosion) à partir des modèles Bond Graph incertains sous forme des transformations linéaires fractionnaires (*en anglais LFT: Linear Fractional Transformation*)

et d'étudier la robustesse de ces indicateurs de faute vis-à-vis à des incertitudes paramétriques du modèle, puis calculer les seuils adaptatifs permettant ainsi d'évaluer ces relations de redondances analytiques.

Un grand nombre de travaux ont été consacrés à la surveillance des processus chimiques utilisant un modèle (voir les synthèses de *P.M. Frank (1990)* [9]). Pour ces approches quantitatives, la première étape consiste à générer des relations de redondance analytique, qui expriment la différence entre les informations issues du système réel et celles générées par son modèle de fonctionnement normal. Ces relations appelées également résidus, caractérisent le mode de fonctionnement du système et sont nulles en fonctionnement normal. L'espace de parité, les observateurs et les méthodes de filtrage sont bien adaptés pour le diagnostic des défauts capteurs et actionneurs. Les paramètres des RRAs générées n'ont pas une perception physique claire et ne peuvent pas être associés directement aux défauts sur les composants physiques. Les défaillances détectées dans les travaux de *G. Paviglianiti & al. (2007)* [10] *F. Caccavale & al. (2009)* [11] sont principalement des défauts capteurs (pour mesurer la température du milieu réactionnel, de la double enveloppe, la pression à l'intérieur de la cuve...), alors que dans l'industrie il existe presque toujours des redondances matérielles. Les indicateurs de fautes sensibles aux défauts processus ne sont pas systématiquement déduits.

Intérêt des Bond Graph pour le diagnostic des procédés chimiques

1. L'existant

L'outil bond graph *H.M. Paynter (1961)* [12] a été initialement utilisé pour la modélisation des systèmes physiques. La démarche habituelle des utilisateurs de cet outil consiste à considérer le modèle bond graph comme un modèle de connaissance pour la simulation et la commande des systèmes dynamiques *D. Karnopp & al. (2000)* [13]. L'idée d'utiliser une seule représentation (le bond graph) pour la modélisation, l'analyse et la synthèse des lois de commande en exploitant la causalité est récente.

Concernant l'utilisation des bond graphs pour les problèmes de surveillance, on trouve quelques équipes qui utilisent cette démarche dans le monde. On peut citer par exemple les travaux récents sur le diagnostic des systèmes à l'aide des bond graphs qualitatifs [14] [15].

Les difficultés de ces approches résident dans le fait que les modèles qualitatifs peuvent avoir plusieurs comportements possibles (l'augmentation d'un débit d'eau dans un réservoir peut aussi bien augmenter que diminuer la température stockée dans l'accumulateur). Il n'est pas aisé de déterminer les valeurs limites inférieures et supérieures de déviation. D'autre part un problème combinatoire peut apparaître lors des procédures d'inférences pour les systèmes complexes.

Le modèle Bond Graph a été aussi utilisé pour le filtrage d'alarmes. En effet, par son organisation causale, le modèle permet de générer le graphe causal et mettre ainsi en évidence les causes (par un parcours ascendant) et les conséquences (parcours descendant) des alarmes

sur le graphe *B. Ould Bouamama (2002) [16]* *E. Craye & al. (1998) [17]*.

2. Contribution de la thèse

Le présent travail est une continuité des résultats de recherche obtenus dans le cadre d'une thématique qui consiste à utiliser les Bond graph pour la conception des systèmes de supervision. Ces résultats sont obtenus dans le cadre de travaux de thèse et projets de recherche [16] et concernent principalement :

- La génération de Relations Redondances Analytiques (RRAs) déterministe à base du modèle mono-énergie puis thermofluide *A. K. Samantaray & al. (2006) [18]*.

- L'analyse des conditions de surveillabilité structurelle des actionneurs *W. El Osta (2005) [19]*.

- L'informatisation des procédures de génération automatique des algorithmes de surveillance *B. Ould Bouamama & al. (2006) [20]*.

- La génération des des RRAs robustes à base de modèle Bond Graph LFT mono-énergies *M.A. Djeziri & al. (2009) [21]*.

Comme noté plus haut, les procédés chimiques sont représentés par des modèles Bond Graph complexes en raison de couplage de trois phénomènes (fluidique, thermodynamique et chimique). Ces modèles sont fortement non linéaires et leurs paramètres (coefficient d'échange de chaleur, constante de vitesse de réaction, capacité thermique...) sont incertains. La surveillance en ligne de ces procédés à risque en raison de l'apparition des réactions secondaires et d'emballement thermique présente un intérêt scientifique certain du point de vue de la sûreté de fonctionnement et la protection de l'environnement suite à l'apparition de produits polluants indésirables.

Les principales contributions du présent travail de recherche peuvent être résumées comme suit :

- L'élaboration de modèles Bond Graph dynamiques de composant et phénomène chimique sous forme modulaire réutilisable.

- La méthodologie du diagnostic basée sur la génération de RRA candidate à des défauts cinétique et thermodynamique dus à l'apparition des réactions secondaires dans un réacteur chimique sujet à un transfert couplé de matière et de chaleur.

- Le diagnostic robuste aux incertitudes paramétriques (capacité thermiques, coefficients d'échange de chaleur, constantes de vitesse généralement mal définis) du modèle Bond Graph LFT couplé de procédés chimiques.

- L'informatisation de génération RRAs pour une classe de procédé chimique.

- L'application à un procédé réel (installation d'estérification).

3. Organisation du mémoire

Le premier chapitre présente les méthodes qualitatives et quantitatives les plus utilisées dans la littérature pour le diagnostic des processus chimiques et les différentes méthodes

d'analyse des risques. Cet état de l'art est le résultat d'une recherche bibliographique d'une centaine d'articles bien étudiés sur l'évolution de la surveillance des processus chimiques et les différentes méthodes développées.

Une synthèse sur les méthodes de surveillance des réacteurs chimiques à base de modèles analytiques et graphiques (analyse structurelle) est développée dans cette partie. L'intérêt du diagnostic robuste à base du Bond graph est abordé à la fin de ce chapitre.

Le chapitre 2 présente la structure et les propriétés des modèles Bond graph multi-énergies et la modélisation des éléments bond graph incertains. Une classification fonctionnelle des différents composants en génie des procédés a été proposée suivie d'une étude bien détaillée sur la modélisation déterministe et incertaine à base du bond graph couplés sous forme LFT des réactions et des réacteurs chimiques. Dans ce chapitre, les étapes de réalisation d'un modèle bond graph LFT à partir d'un système physique sont développées avec un exemple d'illustration (système hydraulique). Afin d'illustrer la démarche sur un exemple thermofluidique, la modélisation BG-LFT d'un réacteur continu adiabatique à paramètres incertains où se déroule une réaction réversible exothermique est expliquée à la dernière partie du ce chapitre.

Le chapitre 3 présente les différents types de défauts dans un réacteur chimique (actionneurs, processus, capteurs...) et développe une méthodologie de diagnostic robuste basée sur les Bond Graphs couplés pour détecter et localiser les défauts cinétiques et thermodynamiques dus à l'apparition des événements secondaires dans des réacteurs chimiques qui subissent des transferts couplés de chaleur et de matière. Dans cette partie est exposé l'algorithme de génération des RRAs robustes à partir des modèles BG-LFT, où la partie incertaine des RRAs est utilisée pour générer les seuils adaptatifs des résidus. L'analyse de la sensibilité des résidus par rapport aux incertitudes paramétriques permet de définir des indices de sensibilité absolue et relative. Le phénomène d'emballement thermique et l'apparition des réactions secondaires sont étudiés en se basant sur une procédure statistique de décision capable de générer des seuils.

Dans **le chapitre 4**, après un bref historique sur les logiciels dédiés à la modélisation des systèmes chimiques, nous présenterons quelques logiciels de diagnostic à base de modèles qualitatifs et quantitatifs, puis nous décrirons l'implémentation informatique de la méthode développée au chapitre précédent sur le logiciel Symbols, de l'étape de modélisation Bond Graph jusqu'à la génération automatique des Relations Redondances Analytiques (RRAs) robustes afin de surveiller l'évolution d'une réaction chimique et détecter la défaillance.

Le chapitre 5 présente une application sur un procédé chimique réel d'estérification, qui constitue un système non stationnaire, où l'espace paramétrique est plus complexe. Ce chapitre donne aussi une description du processus étudié en détaillant ses caractéristiques physiques non linéaires permettant l'élaboration d'un modèle dynamique global. Le modèle

bond graph global est obtenu par une approche modulaire en élaborant les modèles des différents sous systèmes. Cette partie présente les résultats de génération des RRAs du modèle global avec une analyse de la surveillabilité des différents sous systèmes. L'évaluation des indicateurs de fautes générés a permis de tester les performances de détection et d'isolation (distance de Hamming) du système de surveillance.

Enfin, une conclusion générale et des perspectives sont données à la fin du mémoire.

4. Résultats des travaux de thèse

Les résultats de recherche dans le cadre de ma thèse ont fait l'objet des publications suivantes:

Revue Internationale avec référé (4)

1. **R. El Harabi**, B. Ould Bouamama, M. El Koni Ben Gayed, M.N. Abelkrim, "Bond Graphs for diagnosis of Chemical Processes", *Computers & Chemical Engineering* (Elsevier) **Avis: Accepté**

2. **R. El Harabi**, B. Ould Bouamama, M. El Koni Ben Gayed, M.N. Abelkrim, "Bond Graph Model Based for Robust Fault diagnosis", *International Journal of Simulation- Systems, Science and Technology (IJSSST V12)*. **Avis: Accepté.**

3. **R. El Harabi**, B. Ould Bouamama, M. El Koni Ben Gayed, M.N. Abelkrim, "Bond Graph Approach for Fault Diagnosis of an Industrial Chemical Reactor: Part I: Bond Graph Modeling", *Journal Simulation: Transactions of the Society for Modeling and Simulation International*. **Avis: en révision.**

4. **R. El Harabi**, B. Ould Bouamama, M. El Koni Ben Gayed, M.N. Abelkrim, "Bond Graph Approach for Fault Diagnosis of an Industrial Chemical Reactor: Part II: FDI System Design", *Journal Simulation: Transactions of the Society for Modeling and Simulation International*. **Avis: en révision.**

Conférences Internationales avec actes (8)

1. **R. El Harabi**, B. Ould Bouamama, M. El Koni Ben Gayed, M.N. Abelkrim, "Pseudo Bond Graph for Fault Detection and Isolation of an Industrial Chemical Reactor, Part I: Bond Graph Modeling", 9th International Conference on Bond Graph Modeling and Simulation, 11 – 16 Avril 2010, Orlando, Florida, pp. 180-189. ISBN 978-1-61738-209-3. **Avis: Publié**

2. **R. El Harabi**, B. Ould Bouamama, M. El Koni Ben Gayed, M.N. Abelkrim, "Pseudo Bond Graph for Fault Detection and Isolation of an Industrial Chemical Reactor, Part II: FDI System Design", 9th International Conference on Bond Graph Modeling and Simulation, 11 – 16 Avril 2010, Orlando, Florida, , pp. 190-197. ISBN 978-1-61738-209-3. **Avis: Publié**

3. **R. El Harabi**, B. Ould Bouamama, M. El Koni Ben Gayed, M.N. Abelkrim, "FDI of Chemical Process using Bond Graph Tool", 14th IEEE IFAC International Conference on Methods and Models in Automation and Robotics, 19 – 21 August 2009, Miedzyzdroje, Poland. **Avis: Publié**

4. **R. El Harabi**, B. Ould Bouamama, M. El Koni Ben Gayed, M.N. Abelkrim "Graphical Model Based for Robust FDI", *22nd International Conference on Computer-Aided Production Engineering CAPE'2011*, 27-28 April 2011, Edinburgh, Scotland. **Avis: Accepté**

5. **R. El Harabi**, B. Ould Bouamama, M. El Koni Ben Gayed, M.N. Abelkrim "Bond Graph Model Based for Robust Fault Diagnosis", *the 5th International Conference on Integrated Modeling and Analysis in Applied Control and Automation IMAACA 2011*, 12-14 September 2011, Rome, Italy. **Avis: Accepté**

6. **R. El Harabi**, B. Ould Bouamama, M. El Koni Ben Gayed, M.N. Abelkrim, " Robust Fault Dagnosis on Chemaical System by Using Uncertain Bond Graph Model", *8th IEEE International Multi-Conference on Systems, Signals and Devices SSD'2011*, 22-25 Mars 2011, Sousse, Tunisie, pp.82. ISBN 978-1-4577-0412-3. **Avis: Publié**

7. **R. El Harabi**, B. Ould Bouamama, M. El Koni Ben Gayed, M.N. Abelkrim, "A Bond Graph based Strategy for early Detection of Hazardous states in Chemical Reactors", 10th international Conference on Sciences and Techniques of Automatic control & computer engineering STA'2009, Hammamet, Tunisia, 2009. **Avis: Publié**

8. **R. El Harabi**, M. El Koni Ben Gayed, M.N. Abelkrim, B. Ould Bouamama, "Pseudo Bond Graph Model of chemical Reactor", 9th International Conference on Sciences and Techniques of Automatic control (STA'08), Sousse, Tunisia, 2008. **Avis: Publié**

Conférences Internationales sans actes (2)

1. **R. El Harabi**, B. Ould Bouamama, M. El Koni Ben Gayed, M.N. Abelkrim "La Modélisation des réacteurs chimiques à l'aide de l'outil Bond Graph". Intervention à l'Ecole d'Hiver Franco-Tunisienne des Bond Graphs, Tunisie, Djerba, 13-14 Décembre 2008.

2. **R. El Harabi**, B. Ould Bouamama, M. El Koni Ben Gayed, M.N. Abelkrim "Bond Graph Based model for detection of Secondary reaction in chemical reactors". Participation par poster à la première journée Internationale Recherche pour l'Innovation Technologique et la Création Industrielle (RITCI 2010), Tunisie, Gabès, 23 Janvier 2010

Participations aux Séminaires

- 2010-2011 : Participation à la huitième International Multi-Conference on Systems, Signals & Devices SSD-11, qui s'est déroulée du 22 au 25 Mars 2011 à Sousse, Tunisie.

- 2009-2010 : Participation à la neuvième International Conference on Bond Graph Modeling and Simulation, qui s'est déroulée du 11 au 16 Avril 2010 à Orlando, Florida.

- 2009-2010 : Participation à la deuxième journée Recherche et Développement de Polytech'Lille, sur la thématique : Environnement et Maîtrise de l'énergie : enjeux et innovation, qui s'est tenue à Villeneuve d'Ascq, Lille, France, le 1 Avril 2010.

- 2009-2010 : Participation à la première journée Scientifique Internationale (RITCI2010) qui s'est déroulée le Samedi 23 Janvier à Gabès, Tunisie.

- 2009-2010 : Participation à la 10th international Conference on Sciences and Techniques

of Automatic control & computer engineering (STA2009) qui s'est déroulée du 20 au 22 Décembre à Hamammet, Tunisie.

- 2008-2009 : Participation à la 2nd IFAC International Conference on Intelligent Control Systems and Signal Processing (ICONS 2009) qui s'est déroulée du 21 au 23 Septembre 2009 à Istanbul, Turquie.

- 2008-2009 : Participation au Workshop GIS3SGS 2009, sur la thématique : Surveillance, sûreté et Sécurité des Grands Systèmes qui s'est déroulée du 03 au 04 Juin 2009 à Nancy, France.

- 2008-2009 : Participation à la journée et Développement de Polytech'Lille, sur la thématique : La mécatronique et la Robotique et les applications industrielles, qui s'est tenue à Villeneuve d'Ascq, Lille, France, le 28 Mai 2009.

- 2008-2009 : Participation à la journée GT S3 sur la thématique : Sûreté-Surveillance-Supervision qui s'est tenue à Paris, France, le 25 Mai 2009.

- 2008-2009 : Participation à la journée 5eme Rencontre Régionale des Chercheurs Internationaux du Centre de Mobilité Nord-Pas de Calais, qui s'est tenue à Lille, France, le 15 Avril 2009.

- 2008-2009 : Participation à la neuvième Conférence Internationale : Sciences and Techniques of Automatic control and computer engineering (STA'2008) qui s'est déroulée du 20 au 23 Décembre 2008 à Sousse, Tunisie.

Organisation et Participation aux Ecoles Internationales et Nationales

- 2009-2010 : Membre du comité d'organisation de la première Journée Scientifique Internationale (RITCI'10): Recherche pour l'Innovation et la Création Industrielle. ENIG, Gabès, Tunisie. Samedi 23 Janvier 2010.

- 2009-2010 : **R. El Harabi**, B. Ould Bouamama, M. El Koni Ben Gayed, M.N. Abekrim "Bond Graph Based model for detection of Secondary reaction in chemical reactors". Participation par poster à la première journée Internationale Recherche pour l'Innovation Technologique et la Création Industrielle (RITCI 2010), Tunisie, Gabès, 23 Janvier 2010.

- 2008-2009 : Membre du comité d'organisation d'Ecole d'Hiver Franco-Tunisienne des Bond Graphs (E_H'08): Conception Intégrée des Systèmes d'Ingénierie. Tunisie, Djerba, 13-14 Décembre 2008.

- 2008-2009 : **R. El Harabi**. « La Modélisation des réacteurs chimiques à l'aide de l'outil Bond Graph ». Intervention à l'Ecole d'Hiver Franco-Tunisienne des Bond Graphs, Tunisie, Djerba, 13-14 Décembre 2008.

Formation en France (pendant les 18 mois du séjour scientifique)

- 2009-2010 : Participation à la formation « Droit de l'internet », qui s'est déroulée le 05 et 09 juin 2010 à Lille, France.

- 2008-2009 : Participation au séminaire « Intelligence économique et dynamique d'inno-

vation », qui s'est déroulée du 17-18-19 Mai et 10 juin 2009 à Lille, France.

- 2008-2009 : Participation à la formation Anglais (30 heures) dans le cadre l'Ecole Doctorale « Science pour l'Ingénieur », de 4 Mars à 20 Mai 2009 à Lille, France.

Chapitre 1

Etat de l'art sur le diagnostic des processus chimiques

1.1 Introduction

L'industrie chimique constitue un des piliers de l'économie mondiale, mais elle doit faire face depuis quelques années à une image peu flatteuse d'industrie dangereuse et polluante. L'historique des accidents dus aux substances chimiques dangereuses montre que cette industrie demeure une des sources importantes d'incidents graves qui sont relativement plus probables que l'on croit. On peut citer quelques exemples récents de tels accidents survenus dans le monde qui ont causé des pertes de vie importantes et des dommages majeurs aux biens et à l'environnement : L'explosion des quatre réacteurs à la centrale nucléaire de Fukushima-Daiichi au nord-est du Japon en 2011, la destruction de l'unité d'oxydation de l'usine de Flixborough *F.P. Less. (1996)* [6], le nuage toxique de dioxine dispersé sur la commune de Seveso, les 4000 victimes et 200000 blessés du désastre de Bhopal ou encore l'explosion de l'usine AZF,...*J.P. Gupta. (2005)* [22] d'autres accidents majeurs peuvent être cités tels que ceux de Mississauga en Ontario, St-Basile-le-Grand au Québec, Tchernobyl en Ukraine, Sandoz à Bâle, la raffinerie de Feyzin à Lyon, silos de Metz et de Blaye, etc. . . tant d'images qui restent gravées dans la mémoire de ceux qui l'ont vécu mais aussi de tous les acteurs de la sécurité qui cherchent aujourd'hui encore à tirer les leçons et éviter les erreurs du passé *J.L. Gustin. (2002)* [23] *T.A. Kletz (2006)* [24].

De nombreux accidents industriels ont été provoqués par des réactions dont la mise en œuvre n'a pas été contrôlée : emballement thermique, réaction secondaire non contrôlée. . . Ces conséquences sont souvent importantes dans la mesure où une réaction chimique non désirée est susceptible, suivant les réactifs mis en œuvre, de donner matière à la fois à une explosion et à l'émission de produits toxiques ou inflammables dans l'environnement. Les causes et les raisons principales identifiées relatives au développement de réactions non contrôlées dans

l'industrie sont imputables à un défaut de conception ou de fonctionnement des installations et des procédés de fabrication. Ces accidents ont démontré à quel point les incidents causés par ce type d'industrie pouvaient être impressionnants et destructeurs. Face à ces événements, il est apparu nécessaire de se reposer la question du risque chimique en remettant en cause les pratiques industrielles et en identifiant de nouveaux enjeux technologiques (diagnostic, sûreté de fonctionnement, supervision . . .). Ce développement des aspects de sécurité coïncide avec une mutation du contexte social et l'émergence de nouvelles thématiques comme l'écologie et la protection de l'environnement, inscrits aujourd'hui dans le développement durable [25]. Cette prise de conscience du public entraîne dès cette période une moins bonne tolérance vis-à-vis de l'impact des industries sur l'homme et son environnement (rejet d'effluents, déchets, pollution sonore, etc. . .).

Les phénomènes qui interviennent dans le procédé chimique doivent être caractérisés de façon à s'assurer qu'il est le mieux adapté, tant au niveau de la conception de l'installation que du choix du mode opératoire. Dans un procédé chimique, la non-linéarité et la sensibilité de certains paramètres influencent la marche de la réaction chimique. Une faible variation d'un de ces paramètres peut changer énormément le cours de la réaction et pourrait même causer un accident.

Dans le cas d'un réacteur chimique, les raisons principales qui conduisent à sa surveillance sont, d'une part, le maintien de sa conduite optimale (opération en ligne), et d'autre part, sa maintenance. L'aide à la conduite d'un procédé fournit à l'opérateur les outils nécessaires à la prise de décision d'actions visant à le faire fonctionner au mieux (production maximale, sécurité, non-dégradation des équipements). Cette aide à la conduite nécessite une surveillance du procédé afin de détecter toutes les anomalies de fonctionnement et d'identifier le mieux possible les causes. La maintenance qui a pour objectif le remplacement ou la réparation d'équipements usés ou défectueux, s'effectue le plus souvent hors ligne. Il est important de noter que, si la conduite et la maintenance sont des opérations qui s'inscrivent dans le temps de manière différente, la surveillance qu'elles impliquent doit être en ligne pour les deux objectifs. Sous cet éclairage concernant la sûreté de fonctionnement, l'intérêt de parvenir à déterminer en temps réel l'apparition d'un dysfonctionnement au cours de la mise en œuvre d'un procédé chimique, est justifié afin de pouvoir remédier efficacement au problème de la détection de défaillances chimiques.

Dans le domaine de la supervision des processus chimiques, les outils industriels utilisés sont basés principalement sur la redondance matérielle et les métrologies de seuillage pour la surveillance des paramètres opératoires et la conduite du procédé. Cet aspect est connu dans l'industrie sous l'appellation "gestion des alarmes". Les questions de détection et localisation de défauts et les moyens de reconfiguration (aspect FDI (Fault Detection and Isolation) et FTC (Fault Tolerant Control)) restent encore ouvertes.

Ces dernières années, les problèmes de filtrage d’alarmes et de détection et localisation de défauts en temps réel sont traités dans le cadre de projets européens *B. Ould Bouamama (2002)* [16] *E. Craye & al. (1998)* [17] ou industriels par l’implémentation de boîte à outils appliqués à des procédés pilotes *B. Ould Bouamama & al. (2006)* [3]. Toutefois ces installations concernent des procédés énergétiques : les phénomènes de la transformation de la matière ne sont pas considérés. Dans ce contexte, de nombreuses approches sont développées, en vue de la détection de défaillances et du diagnostic, par les différentes communautés de recherche en automatique, génie chimique (INERIS : Institut National de l’Environnement Industriel et des Risques en France [25]) et en intelligence artificielle (Laboratoire des Risques Chimiques et Procédés, INSA de Rouen), qui s’intéressent au domaine de la supervision, et plus particulièrement, au diagnostic, dans le but principal est la sécurité des processus chimiques (éviter le risque d’emballement thermique, les dangers liés aux réactions chimiques mises en œuvre et l’impact des principaux effets de dérive sur les réactions chimiques examinées).

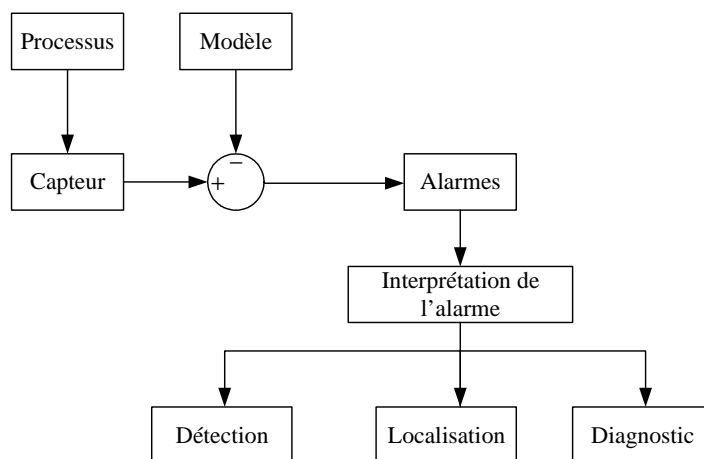


FIG. 1.1 – Schéma de principe de la méthode de surveillance.

La littérature sur le diagnostic de défaillances est vaste, s’étendant des méthodes analytiques à l’intelligence artificielle et aux méthodes statistiques. Toutes les méthodes de surveillance sont basées sur le même principe (Fig. 1.1) qui consiste à comparer les données issues de capteurs disponibles et celle données par un modèle.

En fonction du type de modèle utilisé, on distingue (Fig. 1.2) les méthodes dites à base de modèle (le modèle utilisé est analytique) et les méthodes sans modèles (souvent dites à base de signal ou sans modèle à priori). Les méthodes dites à base de modèle ont besoin de modèle précis. Ces modèles peuvent être quantitatifs *V. Venkatasubramanian & al. (2003)* [26] [27] [28] (sous formes de tables, équations différentielles...) qualitatifs, semi-quantitatifs ou flous. Par ailleurs, d’autres méthodes n’utilisent aucune forme de modèle, et s’appuient seulement sur des données historiques du processus.

L'utilisation d'une des ces méthodes est dictée par le type de connaissance dont on dispose pour l'accomplissement de telle ou telle étape du diagnostic. En réalité, ces approches coexistent souvent au sein d'un même système de diagnostic. Cette utilisation conjointe permet l'exploitation de l'ensemble des informations disponibles concernant le fonctionnement du système, ainsi que l'amélioration des performances de la procédure de détection et d'isolation des défauts.

On peut aussi distinguer des méthodes réalisées hors ligne qui consiste à analyser les risques et déterminer les causes et les conséquences de ce risque sur la fonction principale du procédé. On peut citer les méthodes HAZOP Analysis (HAZard and OPerability) et AMDEC (Analyse des Modes de Défaillances et de leurs Effets et de leurs Criticités)

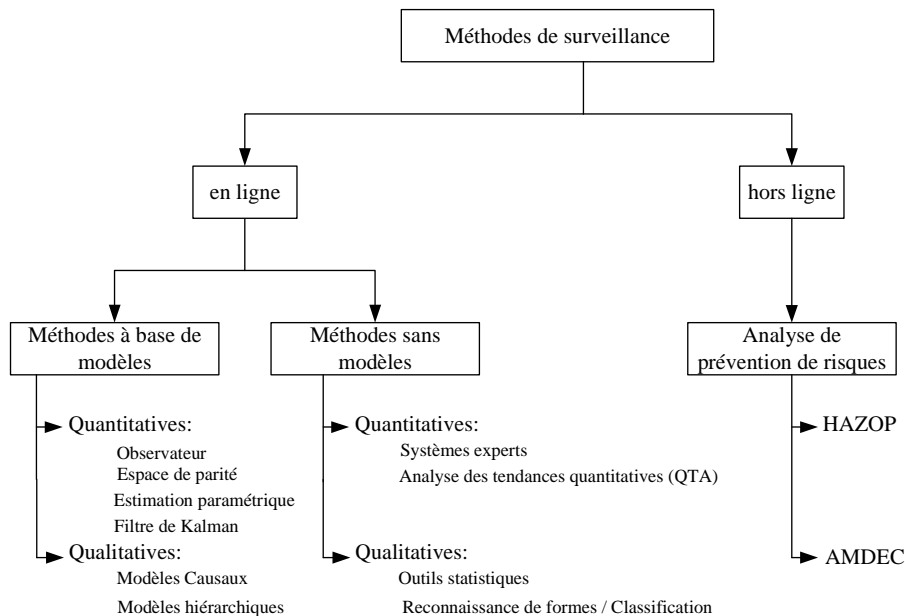


FIG. 1.2 – Classification des méthodes de diagnostic

1.2 Principe de la surveillance

La supervision est généralement définie comme une tâche de commande et de surveillance de l'exécution d'une opération ou d'un travail accompli par d'autres agents (hommes ou machines), sans rentrer dans les détails de cette exécution. Le concept de supervision s'applique donc dans un cadre hiérarchisé à deux niveaux au moins. Superviser le fonctionnement d'installations industrielles est devenu aujourd'hui le rôle principal des opérateurs humains, les systèmes automatiques assurant localement le contrôle et la commande (Fig. 1.3).

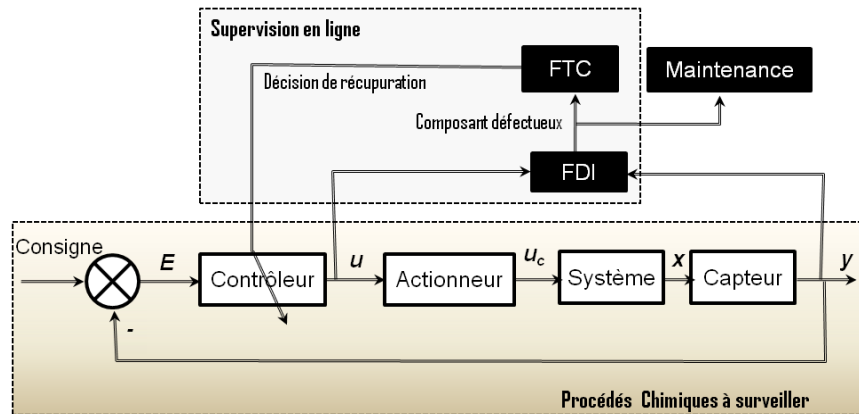


FIG. 1.3 – Surveillance des processus chimiques

Des tâches multiples telles que la prédiction, le diagnostic, le pronostic ou le conseil d'action relèvent de la supervision. Le diagnostic, se décompose en plusieurs sous tâches : détection d'une anomalie, localisation du sous systèmes défaillant et caractérisation d'un défaut ou d'une défaillance (Fig. 1.4). il est fondé sur trois fonctions principales :

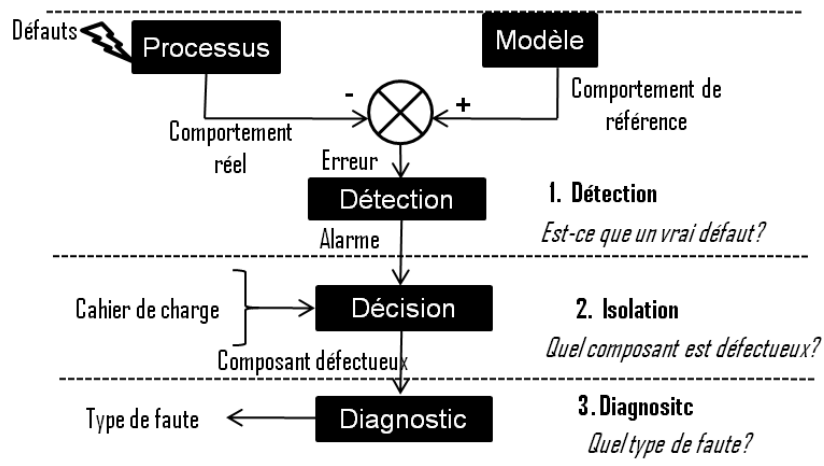


FIG. 1.4 – Etapes de détection et isolation des fautes

- **Détection :** ce premier niveau de diagnostic consiste à déterminer de façon rapide et fiable l'existence d'une anomalie. Ça revient à choisir entre deux hypothèses, la première correspond au fonctionnement normal, la deuxième correspond au fonctionnement défaillant. Pour détecter les défauts d'un système, il faut donc être capable de classer les situations observables comme étant normales ou anormales.

- **Localisation :** cette étape présente le deuxième niveau de diagnostic, consistant à déterminer les anomalies produites (sans les caractériser précisément). Elle est plus difficile dans

le cas de défauts multiples où plusieurs défauts peuvent avoir lieu en même temps.

- **Identification** : c'est le troisième niveau de diagnostic consistant à caractériser précisément les anomalies qui se sont produites. Cette tâche consiste par exemple, à déterminer la taille (amplitude) et la dynamique (forme) du défaut.

1.3 Différentes méthodes de surveillance des procédés chimiques

Cette partie est consacrée à la présentation des concepts fondamentaux des approches de diagnostic en ligne et hors ligne. Elle s'appuie sur la classification des approches selon le type de méthode ou de modèles utilisés. Alors, en fonction du type de connaissance utilisée pour vérifier la cohérence entre les observations réelles et de référence en ligne, on distingue deux types de méthodes: les méthodes avec modèle et les méthodes sans modèle.

1.3.1 Méthodes à base d'un modèle

Dans le domaine de l'automatique et de la supervision des processus, la conception et de l'utilisation des modèles mathématiques précis pour la détection et le diagnostic est bien connue. Mais, dans beaucoup de cas, la construction d'un tel modèle est très difficile, de par la nature complexe ou non linéaire du processus lui-même, des paramètres variables dans le temps ou de manque de mesures disponibles. Dans la pratique, il est démontré que, dans ce cas, l'opérateur humain peut fournir une meilleure supervision en utilisant sa propre connaissance et son expérience pour assurer le bon fonctionnement du processus.

De ce fait, les connaissances de l'expert sur la structure et le comportement du processus sont exploitées par diverses techniques.

Pour les approches multi-sigaux, appelées aussi méthodes à base de modèles, la première étape consiste à générer des relations de redondance analytique, qui expriment la différence entre les informations issues du système réel et celles générées par son modèle de fonctionnement normal. L'évaluation numérique de ces relations produit des résidus qui caractérisent le mode de fonctionnement du système.

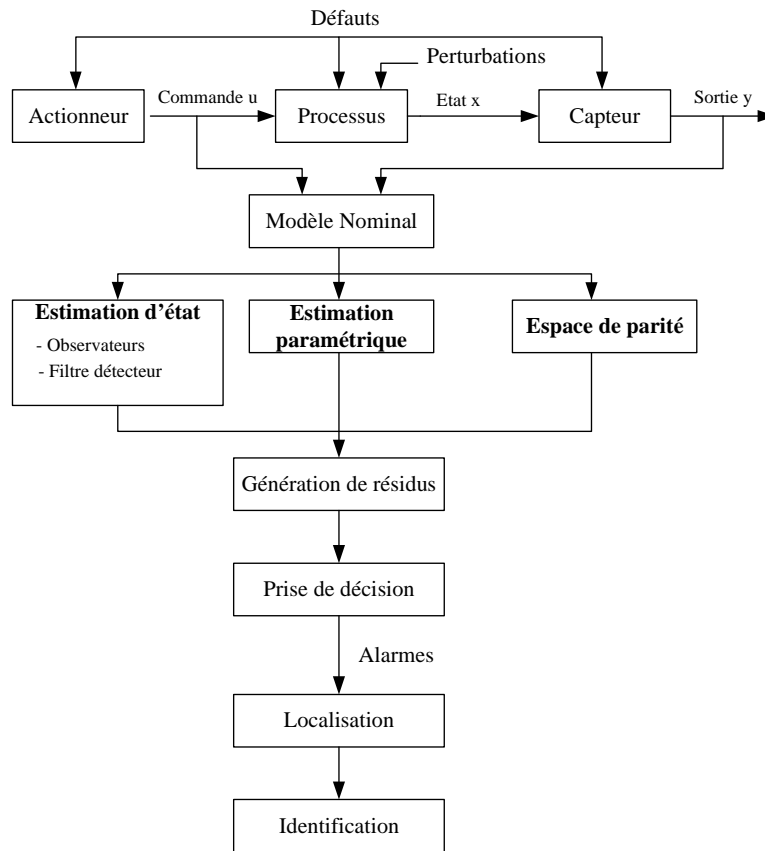


FIG. 1.5 – Architecture générale de la détection de défauts à base de modèles

La détection et la localisation de défaut basée sur l'utilisation de modèles peut être divisée en trois étapes principales (Fig. 1.5). Lors de la première étape, les signaux d'entrée et de sortie du système sont utilisés pour générer un résidu c'est-à-dire un signal mettant en évidence la présence d'un défaut. La génération de résidus est propre à la méthode utilisée (estimation d'état, estimation paramétrique, espace de parité). Les résidus sont analysés pour décider s'il y a ou non présence de défaut. En général, en régime de fonctionnement normal, ce signal est statistiquement nul et s'écarte notablement de zéro en présence de défaut. En réalité la prise de décision de la présence ou non d'une alarme est une problématique complexe en raison du caractère aléatoire des mesures, des incertitudes paramétriques du modèle et des problèmes de dérivation numériques des résidus. La décision peut s'effectuer à l'aide d'un simple test de dépassement de seuil sur les valeurs instantanées ou les moyennes de résidus, en utilisant des fonctions floues, en faisant appel également à la reconnaissance de formes ou en utilisant des seuils adaptatifs qui évoluent en fonction du point de fonctionnement du processus surveillé. La deuxième étape consiste à localiser la panne, c'est-à-dire retrouver l'origine du défaut et isoler le composant défectueux. Cette partie nécessite l'analyse d'un

certain nombre des signatures répertoriées. Enfin, la troisième étape permet d'identifier le type des défauts et de caractériser précisément les anomalies qui se sont produites. Cette tâche consiste par exemple, à déterminer la taille (amplitude) et la dynamique (forme) du défaut.

1.3.1.1 Estimation de l'état

Les méthodes d'estimation d'état ont pour principe de reconstruire les états et les sorties du système à partir des entrées et des sorties. Ce sont des méthodes de génération de résidus indirectes en ce sens qu'elles calculent l'erreur d'estimation de la sortie. L'estimation de l'état peut être effectuée à l'aide d'observateurs dans le cas déterministe ou de filtres dans le cas stochastique (filtre de Kalman ou filtres détecteurs de défauts).

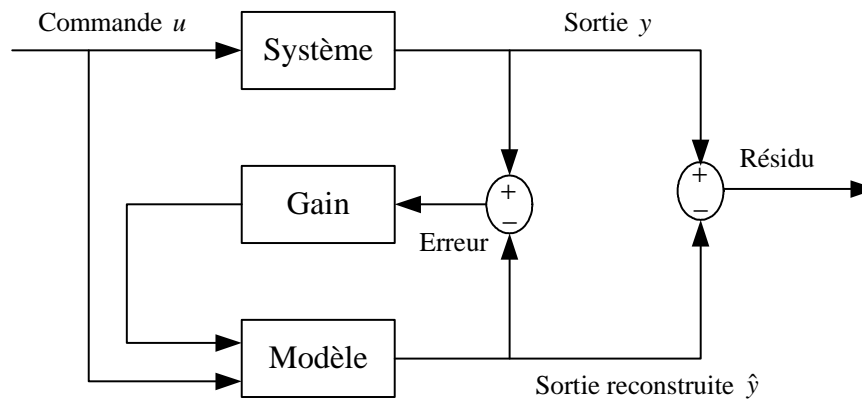


FIG. 1.6 – Principe général de génération de résidu à l'aide d'un estimateur.

Les deux méthodes présentent des analogies dans leur formulation et peuvent être synthétisées par la figure 1.6, la différence provenant du mode de calcul des paramètres du reconstruteur en fonction du contexte choisi (cas continu ou discret, déterministe ou stochastique). C'est l'approche duale à l'estimation des paramètres. Les techniques d'estimation d'état utilisent des données de base brute pour estimer l'état du système et par voie de conséquence ses sorties. Celles-ci sont comparées aux sorties réelles : tout écart entre la valeur mesurée de la sortie et sa valeur réelle constitue un résidu.

1.3.1.1.1 Observateurs

En automatique et en théorie de l'information, un observateur d'état est une extension d'un modèle représenté sous forme de représentation d'état. Lorsque l'état du système n'est pas mesurable, on construit un observateur qui permet de reconstruire l'état à partir d'un modèle du système dynamique et des mesures d'autres grandeurs.

Parmi les travaux de recherche sur la surveillance des réacteurs chimiques et la génération

de résidus à l'aide d'observateurs, on peut citer ceux développés dans *G. Paviglianiti & al. (2007)* [10] et *F. Caccavale & al. (2009)* [11]. Ces travaux sont basés sur un banc de deux observateurs adaptatifs pour la génération des résidus qui garantit la détection et l'isolation des défauts capteurs en présence des perturbations externes et des incertitudes du modèle chimique. L'approche est adoptée pour la conception des gains, alors que la dynamique inconnue du réacteur c.à.d la chaleur libérée par la réaction et d'autres paramètres mal connus (par exemple, le coefficient de transfert de la chaleur) sont estimés par une interpolation en ligne des réseaux de neurones à base des fonctions radiales (*en anglais Radial Basis Function, RBF*). Les évaluations fournies par les observateurs et les mesures de capteur sont traitées par un système de prise de décision qui identifie le capteur défectueux. Les mesures directes des concentrations des réactifs et/ou de la chaleur libérée par la réaction ne sont pas disponibles. Elles sont estimées à l'aide d'un observateur non linéaire et le coefficient de transfert de la chaleur est reconstruit à partir de cette observation et la chaleur libérée par la réaction peut être déterminée en adoptant la méthode calorimétrique *H. Schuler & al. (1992)* [29]. Donc, l'évaluation de paramètre est effectuée grâce à la courbe de la puissance thermique expérimentale libérée par le mélange de la réaction dans un réacteur calorimétrique *L. Balland & al. (1999)* [30].

S. K. Dash & al. (2001) [31], *D. Odloak & al. (2005)* [32] et *R. Tarantino & al. (2000)* [33] ont également formulé respectivement des observateurs de Luenberger généralisé et celui à entrée inconnue en considérant un réacteur continu parfaitement agité non linéaire en estimant les concentrations de réactifs et produits et les deux températures dans le réacteur et la double enveloppe. Les défauts étudiés sont les défauts sur les paramètres dans le modèle de procédé tels que le facteur de fréquence dans l'équation d'Arrhénius pour la réaction finale, la masse molaire et la température de réactif. L'observateur à entrée inconnue estime bien les défauts de réacteur de modèle linéarisé autour d'un point de fonctionnement et l'algorithme de diagnostic est plus réduit que des autres méthodes. Les résidus générés ne sont pas généralement nuls en fonctionnement normal, à cause des bruits et des incertitudes. Ainsi, le diagnostic robuste aux incertitudes à base d'observateurs a fait l'objet de plusieurs travaux de recherches ces dernières années où *S. Rajaraman & al. (2006)* [34] utilisent la même méthode de Luenberger pour la génération des résidus, avec des incertitudes paramétriques structurées et un test probabiliste "de Monte Carlo" pour l'évaluation. Les défaillances considérées dans ce travail sont strictement liées au placement des vannes de l'eau chaude et froide du système de refroidissement.

Pour des processus chimiques fortement exothermiques, des capteurs moniteurs de la température sont souvent dupliqués dans des réacteurs batch. Donc, on suppose avoir une architecture duplex de capteur matériel et également deux ensembles de mesures. Évidemment, avec seulement deux mesures physiques, il est possible de détecter mais de ne pas isoler un

défaut. Par conséquent, quatre capteurs de température sont considérés, deux dans le réacteur et deux dans la double enveloppe *G. Paviglianiti & al. (2007)* [10].

Dans la littérature, le multiobservateur est construit par interpolation d'observateur locaux d'ordre plein de type Luenberger par exemple.

Les observateurs sont bien adaptés pour le diagnostic des défauts capteurs et actionneurs. Les paramètres des RRAs générées n'ont pas une perception physique claire et ne peuvent pas être associés directement aux défauts sur les composants physiques. L'extension de la théorie de l'observateur aux systèmes non linéaires reste un domaine où la recherche est très active, mais l'utilisation la plus commune est l'emploi d'un filtre de kalman étendu.

Les performances d'isolation des produits sont faibles et nécessitent souvent la mise en place d'un banc d'observation sur les actionneurs et les capteurs.

1.3.1.1.2 Filtrage

La méthode des filtres s'inscrit dans une stratégie de maintenance et de prévention des défaillances. Elle est basée sur la surveillance en continu de l'évolution du procédé concerné afin d'optimiser en même temps, la sécurité, la qualité et le coût de fonctionnement d'une installation.

L. Balland & al. (2002) [35] ont réalisé un certain nombre de travaux concernant cette stratégie de Kalman en l'appliquant à des processus batch pour l'étude de sécurité, la mise en œuvre d'un procédé chimique à l'échelle industrielle et à la détection d'incidents à partir de l'évolution des variables tel que le flux de la chaleur. *Y. Chetouani (2006)* [36] montre que cette méthode permet de localiser tout changement par rapport au modèle représentant le comportement normal de fonctionnement, et d'identifier le nouveau modèle décrivant le plus fidèlement l'évolution du procédé. Par ailleurs, l'application consiste à déceler l'origine d'une défaillance d'équipements dans un réacteur chimique muni d'une double enveloppe, telle qu'une baisse de débit du fluide de refroidissement circulant dans cette dernière pendant l'étape de pré-chauffage du milieu réactionnel. La réaction étudiée est une réaction exothermique d'oxydo-réduction, l'oxydation de thiosulfate de sodium par le peroxyde d'hydrogène.

La méthode de diagnostic est basée sur l'analyse de l'évolution des innovations représentant l'écart entre les sorties réelles et celles prédites d'un procédé donné. Elle résout en même temps le problème de la détection de dysfonctionnements [36] et la localisation de leur origine physique. Le nombre de filtres est défini, en principe, à partir de la liste exhaustive de tous les modèles de dysfonctionnements. Des filtres multiples permettent de faire le lien entre les anomalies détectées dans l'évolution du système et une (ou plusieurs) situation(s) répertoriée(s) des dysfonctionnements du système. Cette méthode consiste à traiter les observations par un ensemble de Filtres de Kalman Etendus (EKF) *A.S. Willsky & al. (1980)* [37] dont chacun correspond à une hypothèse de panne bien particulière.

Dans le cas des réactions chimiques exothermiques *J. Villiermaux (1993)* [38] *L. Balland*

Ét al. (2000) [39], l'absence du dissolvant mène à des risques thermiques plus élevés d'emballement parce que le dissolvant ne peut pas agir en tant qu'amortisseur thermique. Il est utile d'absorber le choc thermique et de commander la réaction chimique. En l'absence du dissolvant, il est alors important de commander parfaitement le progrès de la réaction. Cependant, le taux d'écoulement de la chaleur libéré par les phénomènes physico-chimiques ayant lieu dans le mélange de la réaction peut être calculé à partir d'un modèle mathématique établi sur des bilans massique et énergétique et dans le mélange de la réaction, avec les mêmes hypothèses que pour le logiciel d'exploitation. Cette puissance sera comparée à celle obtenue au logiciel d'exploitation.

De même, le manque de modèles liant la cinétique chimique des réactions dans les mélanges de la réaction non aqueux avec des coefficients d'activité mène au choix d'un modèle basé sur des concentrations. Les paramètres énergiques et cinétiques étaient déterminés grâce à une méthode d'évaluation localement convergente basée sur l'algorithme génétique. Les résultats trouvés ont permis de représenter tous les profils de puissance de différentes expériences.

Par ailleurs, l'intérêt de ces travaux est de proposer les modèles simples pour représenter l'évolution thermo-chimique des systèmes réactionnels complexes. Ceci permet aux réacteurs chimiques industriels de répondre aux exigences des études de surveillance et de régulation de processus.

Le filtre du Kalman est basé sur une linéarisation permettant aux états du système non linéaire d'être estimés. En conséquence, il ne peut pas garantir que l'évaluation convergera. Si le filtre converge, la précision de l'évaluation dépend de la trajectoire du système. Un autre inconvénient concernant le filtre linéaire est le long temps de calcul requis ; le gain est lié aux matrices de Jacobian du modèle basé sur la valeur prévue. Ces matrices doivent être calculées en ligne. Les systèmes chimiques étant généralement décrits par des modèles non stationnaires dû à la variation des paramètres (coefficient d'échange de chaleur, ...).

Ces méthodes (observateurs, filtres) sont très utilisées pour les systèmes linéaires afin d'éliminer l'effet des bruits de mesures et des perturbations hautes fréquences sur les résidus. Il est également intéressant d'utiliser ces approches dans le cas particulier où les incertitudes paramétriques n'interviennent pas à la même fréquence que les défauts. En effet, la détection de défaut réussie a besoin d'un ajustement judicieux du rapport entre les normes des matrices du covariance qui exprime la réponse du filtre aux anomalies.

1.3.1.2 Estimation paramétrique

Cette approche considère que l'influence de défauts se reflète sur les paramètres et non pas uniquement, comme c'est le cas des observateurs, sur les variables du système physique. Le principe de cette méthode consiste à estimer en continu des paramètres du procédé en utilisant les mesures d'entrée/sortie et en évaluant la distance qui les sépare des valeurs de

référence de l'état normal du procédé. L'estimation paramétrique possède l'avantage d'apporter de l'information sur l'importance des déviations et la nature physique. Toutefois, un des inconvénients majeurs de la méthode réside dans la nécessité d'avoir un système physique excité en permanence. Ceci pose, donc, des problèmes d'ordre pratique dans le cas de procédés dangereux, coûteux ou fonctionnant en mode stationnaire. De plus, les relations entre paramètres mathématiques et physiques ne sont pas toujours inversibles de façon unitaire, ce qui complique la tâche du diagnostic basé sur les résidus. Donc, l'estimation paramétrique repose sur l'identification des paramètres du système. Elle utilise les signaux d'entrée/sortie en ligne pour estimer les paramètres du modèle analytique du système. Ces estimés seront comparés avec des valeurs de référence afin de générer les résidus.

Dans le cas où les valeurs de référence ou nominales sont inconnues, d'autres approches consistent à les remplacer par des valeurs estimées précédemment.

Par ailleurs, le diagnostic des défauts à base de modèle peut être effectué en utilisant les techniques d'identification. Cette approche est basée sur l'hypothèse que les défauts se reflètent sur les paramètres physiques du système. Elle suppose l'existence d'un modèle paramétrique décrivant le comportement du système et que les valeurs nominales des paramètres soient connues, Fig. 1.7. Elle consiste alors à identifier les paramètres caractérisant le fonctionnement réel (masse, coefficient de viscosité,...), à partir des mesures des entrées et des sorties du système [40]. Cette approche donne des valeurs à des états à partir des mesures bruitées. Son but est l'obtention d'un état plus proche à l'état réel de système.

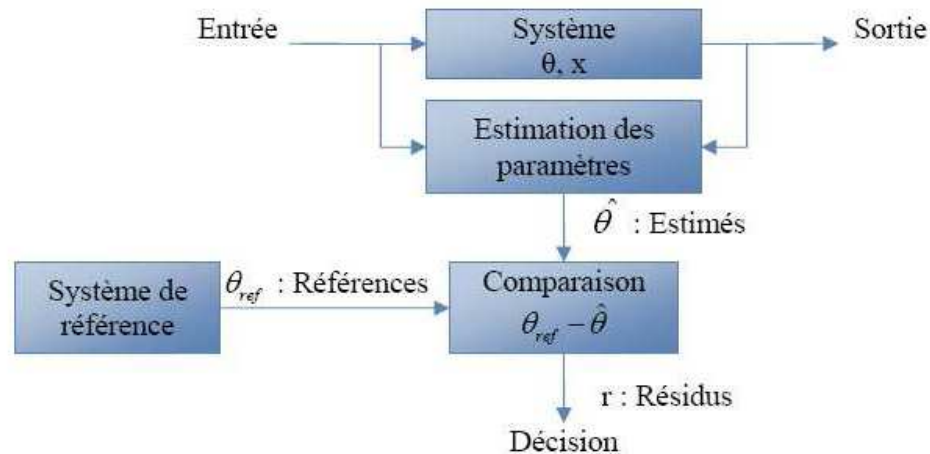


FIG. 1.7 – Principe de l'approche par estimation paramétrique.

Dans *A.M. Benkouider & al.* [41], une identification paramétrique basée sur l'utilisation des modèles Auto-Régressifs à Moyenne mobile avec variable eXogène (ARMAX) est appliquée à un réacteur chimique afin de modéliser le comportement dynamique du milieu réactionnel

en fonction de la température du thermofluide dans la double enveloppe. Ce travail a pour but d'établir un modèle de comportement de la dynamique d'un procédé industriel. Ce modèle permet de reproduire la dynamique du procédé dans les différentes conditions de fonctionnement. Le modèle identifié est établi sous les conditions normales de fonctionnement. Ceci permet de distinguer le mode normal d'un mode anormal.

Les méthodes d'identification présentent l'avantage d'avoir des modèles pour le diagnostic sans utiliser les lois complexes physico-chimiques. Mais l'utilisation d'un modèle identifié pour le diagnostic permet uniquement de détecter les défauts paramètres (déviations par rapport à leurs valeurs nominales) et non des composants physiques. En effet, ces paramètres n'ont aucun sens physique.

1.3.1.3 Espace de parité

Cette approche conduit à une réécriture des équations d'état et de mesure, dans laquelle seules des variables connues (commandes et sorties) sont autorisées à figurer. Dans le cas linéaire, ces équations sont connues par les équations de parité et relations de redondance analytique (RRA) dans le cas le plus général. Elle est généralement appliquée dans un espace à temps discret, en prenant des mesures sur un intervalle de temps appelé fenêtre d'observation. La redondance d'information est ainsi créée sans avoir recours aux dérivations successives des mesures.

Cette méthode est plutôt adaptée pour des modèles linéaires ce qui n'est pas le cas des modèles des processus chimiques. Peu de travaux appliqués à des processus chimiques sont développés. On peut citer le papier de *S.K. Dash & al. (2001)* [31], qui consiste à utiliser un modèle d'un réacteur continu parfaitement mélangé (CSTR).

Le principal inconvénient des méthodes analytiques de détection de défaillances est la nécessité d'avoir des modèles mathématiques assez précis et complets, ce qui n'est pas toujours facile pour les processus complexes tels que les processus chimiques. Ces modèles sont limités aux représentations linéaires ou à des modèles non linéaires très spécifiques. Un autre inconvénient est la modélisation des perturbations qui peuvent engendrer des erreurs dans le modèle. En plus, si un type de faute n'a pas été modélisé de manière spécifique, il n'y a pas de garanties que les résidus soient capables de le détecter. Finalement, l'adaptabilité de ces approches aux changements du processus n'est pas considérée.

1.3.1.4 Modèles Causaux

Les graphes causaux sont basés sur des relations de cause à effet : l'expression de telles relations est un principe naturel du raisonnement. L'approche causale est une méthode de modélisation qui est largement utilisée dans les sciences. Les modèles causaux sont très répandus dans tous les formalismes du raisonnement qualitatif. Une définition générale de la

causalité est de la considérer comme une relation spatio-temporelle qui lie la cause à son effet. Les modèles causaux ont donc l'avantage de représenter les relations et les interactions qui lient tous les éléments d'un modèle.

Les graphes causaux apparaissent comme des outils adéquats pour la modélisation causale. Ils peuvent servir de support à des raisonnements variés, comme la simulation, le filtrage de défauts, la localisation de pannes... Comme les arcs d'un graphe symbolisent les relations causales entre les variables, le graphe est une représentation de la causalité des phénomènes physiques dans l'installation. Ces approches sont utilisées pour le filtrage d'alarmes en utilisant une démarche ascendante ou descendante sur le graphe suite à une défaillance pour retrouver la cause ou l'origine du défaut respectivement. La construction du graphe causal est complexe pour le processus chimique en raison du couplage de plusieurs phénomènes (thermique et fluide) et donc d'une forte non linéarité des influences mutuelles.

Graphe orienté et Digraphe Les méthodes qualitatives basées sur la théorie de graphe établissent directement des liens causaux entre les variables du système sous forme des relations causales, ou dans certains cas des relations causales signées liées à un graphe $G(S,A)$ associé à la représentation des systèmes structurés. S est l'ensemble de sommets et A est l'ensemble d'arcs qui représente les relations entre les variables. Ces méthodes utilisent un raisonnement qualitatif, évitant ainsi la complexité du calcul numérique. Parmi les méthodes qualitatives à base de graphe, on peut citer le graphe orienté *C. Commault & al. (2008) [42]* (où S est l'ensemble des variables d'entrée, de sortie et des états linéaires), le graphe causal (où S est l'ensemble de relations entre les variables mesurées), et le graph causal temporel (TCG en anglais : Temporal causal graphs) *P.J. Mosterman & al. (1999) [43]* (des relations causales et temporelles entre les variables du système sont élaborés formellement à l'aide du graphe causal temporel. L'évolution temporelle de ces variables est représentée qualitativement sur les flèches causales sous forme d'intégral entre les paires de variables).

La structure la plus simple de graphe causal est celle du graphe signé orienté (*en anglais SDG: Signed Directed Graph*). Les nœuds d'un SDG correspondent à l'état des variables, et les arcs orientés portent les signes des influences correspondantes :

- le signe est "+" lorsque les variables se rapportant à l'arc évoluent dans le même sens
- le signe est "-" lorsque les variables se rapportant à l'arc évoluent dans le sens opposé

L'état d'une variable appartient à l'ensemble $\{+, 0, -\}$, la valeur est normale (0), trop haute (+) ou trop basse (-) par rapport à la valeur de la variable de référence (Fig. 1.8).

Dans le SDG, les arcs représentent les relations directes entre les nœuds. Le signe (\pm) d'un arc orienté indique la proportionnalité de l'effet. En plus, les relations entre les dérivées d'ordre supérieur peuvent être également incluses dans ces relations.

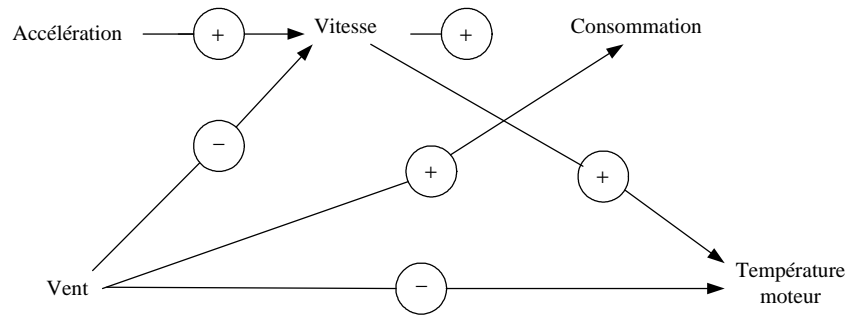
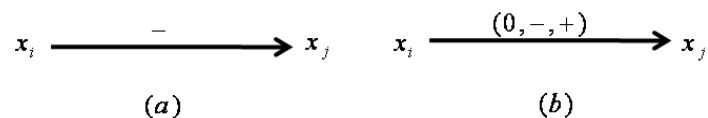


FIG. 1.8 – Exemple d'un SDG issu du comportement d'une voiture.

La figure 1.9 montre que la relation entre deux variables x_i et x_j est exprimée sous forme des dérivées d'ordre zéro. Généralement, la structure de cause-effet rend le SDG favorable pour le diagnostic, où le but est de déterminer les causes de situations anormales observées. En parcourant le graphe vers l'effet observé, on peut déterminer la cause (l'origine) d'une faute. En outre, la modélisation de SDG n'exige pas une base de données riche sur l'évolution des paramètres et la dynamique du processus.

SDGs ont été calculées à partir des connaissances données par un expert du processus ou par l'exploitation des équations de modèles qui définissent le comportement du système *M.R. Maurya & al. (2006)* [44], *H. Vedam & al. (1997)* [45]. Dans les travaux de *M. Iri & al. (1997)* [46] et *M.R. Maurya & al. (2003)* [47], [48], des algorithmes sont proposés pour calculer les modèles de digraphe signé à partir des modèles analytiques de système, tels que les équations ordinaires (ODEs en anglais ordinary differential equations) et les équations algébriques différentielles (DAEs en anglais differential algebraic equations). Les liens sont exprimés en fonction de toutes les variables du système. Le signe des liens de chaque x_k ($k \neq j$) est évalué en calculant le dérivé partiel $\frac{\partial x_j}{\partial x_i}$. La répétition de ces étapes pour chaque équation d'une manière adéquate génère un modèle global de SDG. Les modèles de SDG issus des modèles de comportement nominaux, sont de grand intérêt parce que les équations des processus réels ne sont pas souvent disponibles. Alors, les SDGs représentent une solution intéressante pour la surveillance des défauts.

FIG. 1.9 – Définitions du lien du graphe signé orienté (a) : si x_j augmente x_i diminue. (b) : si le x_j augmente x_i ne change pas brusquement le sens, mais il diminue graduellement.

Tous ces algorithmes appliquent une démarche descendante de parcours de graphes afin

de déterminer les chemins causaux possibles qui expliquent l'effet de l'anomalie observée. Comme indiqué dans *M.R. Maurya & al. (2006)* [44], il existe deux manières différentes pour déduire les indicateurs de fautes: (i) chercher une valeur qualitative différente de zéro d'un nœud mesuré pour obtenir la valeur qualitative possible des nœuds antécédents en suivant le parcours descendant des chemins; Si la valeur prédite de nœud est également mesurée, le signe associé déduit par la démarche descendante est comparé à la valeur observée. Cette démarche s'achève lorsque tous les nœuds antécédents au nœud mesuré sont vérifiés. (ii) combiner le parcours descendant et ascendant, où la propagation descendante se déroule comme elle a été définie précédemment. Alors le parcours inverse est lancé pour chaque indicateur de fautes potentiel (ou proposé) jusqu'à ce que toutes les valeurs qualitatives différentes de zéro des nœuds mesurés seront déterminées.

Pour améliorer l'isolabilité, cette technique basée sur les digraphes signés est combinée à l'analyse de tendance qualitative (QTA en anglais *qualitative trend analysis*) a été présentée dans *M.R. Maurya & al. (2007)* [49]. Cette méthode est recommandée, toutefois seulement des défauts simples ont été considérés, et le QTA ne peut pas surveiller les défauts qui ne sont pas dans sa base de données. Les digraphes signés capturent essentiellement la circulation de l'information de cause/effet et également la direction de l'effet. Les diverses applications de SDG (Signed Digraphs) concernent la simulation, risque et analyse d'opérabilité, diagnostic de défaut et formation d'opérateur qualitatifs *M. R. Maurya & al. (2004)* [50] *R. Vaidhyathan & al. (1995)* [51].

N. Wilcox & al (1994a) [52] *(1994b)* [53] ont traité le problème de détection des défauts utilisant des modèles de Graphe Possible de Cause et d'Effet (GPCE).

C. Palmer & al. (2006) [54] et *D. Nam & al. (1996)* [55] ont employé également des modèles de digraphe pour l'analyse de HAZOP ont discuté la méthodologie pour la construction des rapports de symptôme-défaut. En effet, un des avantages les plus importants d'employer les modèles basés sur les digraphes est qu'ils n'exigent pas beaucoup d'information quantitative.

Les digraphes sont aussi utilisés, récemment, par Raghuraj, Bhushan et Rengaswamy pour concevoir des réseaux de capteur [56]. Ces chercheurs ont proposé des algorithmes pour résoudre le problème de placement de capteur basé sur des critères d'observabilité et de diagnosabilité de défauts. Les algorithmes proposés ont utilisé une représentation de digraphe du processus chimiques pour identifier des placements optimaux de capteur. Cette méthodologie a été développée par *M. Bhushan & al. (2000)* [57] avec la représentation signée de digraphe qui a comme conséquence une conception fiable du système de surveillance. Le travail de *J. Chen & al. (2002)* [58] a exploité l'analyse SDG basée sur des boucles d'avertissement pour le diagnostic. Alors que Lee et ses collègues *G. Lee & al. (2003)* [59] ont proposé un SDG hybride pour la surveillance des défauts multiples. *M.R. Maurya & al. (2001)* [60] ont présenté un cadre complet et systématique pour le développement et l'analyse du modèle à base de

SDG.

Pour plus d'information sur l'analyse de digraphe et ses applications, le lecteur intéressé peut se référer à *K. Hangos & al. (2001)* [61], *R. Li & al. (2001)* [62] et *X. Wang & al. (1996)* [63]. Ces articles présentent la même difficulté pour le diagnostic que celles rencontrées par les graphes causaux

1.3.1.5 Modèles hiérarchiques

Dans ce cas, on décrit le processus de diagnostic par une approche fonctionnelle présentée sous forme d'une décomposition structurelle. La modélisation fonctionnelle comme l'indique son nom se base sur la fonction du composant (i.e. stocker pour la fonction d'un réservoir,...). La modélisation téléologique, quant à elle, exprime la finalité du composant (la fonction téléologique d'une chaudière est la production de la vapeur). Cette fonction sert un dessin, un projet, un but. Un réservoir peut avoir plusieurs fonctions téléologiques (en fonction de son utilisation et de l'interprétation de l'opérateur).

Cette démarche entraîne une ambiguïté en raison de la subjectivité de la notion de fonction : il existe autant de fonctions que d'opérateurs.

Toutefois quelques travaux *F. Caccavale & al. (2009)* [11] *B. Ould Bouamama & al. (2004)* [64] associent des fonctions génériques issues des bond graphs afin de rendre la fonction plus objectives en introduisant les notions d'effort et de flux et les éléments bond graphs (*R*, *C* et *I*). Les modèles externes (utilisant la notion de services et de missions associées aux bonds graphs) trouvent aussi un intérêt dans cette approche.

1.3.2 Méthodes à partir des données historiques

Ces méthodes ne nécessitent pas un modèle mathématique ou structurel du procédé, mais seulement la disponibilité de grandes quantités de données historiques. Il y a divers façons de traiter ces données et de les présenter en tant que connaissance a priori pour le diagnostic. Ceci est connu comme l'extraction des caractéristiques. Elles nécessitent l'apprentissage de modes de fonctionnement défailants et elles sont peu performantes pour la localisation *E.M. Assaf & al (1990)* [65].

1.3.2.1 Approches statistiques

Les techniques statistiques multi-variables sont des outils puissants, capables de comprimer des données et de réduire leur dimensionnalité de sortie telle que l'information essentielle soit maintenue et plus facile à analyser que dans l'ensemble original des données. Ces techniques peuvent également manipuler le bruit et la corrélation pour extraire l'information efficacement.

Ces approches se basent sur l'hypothèse de changements rapides (et non sur l'amplitude) des caractéristiques des signaux ou des paramètres des modèles par rapport à des dynamiques considérées comme étant lentes (procédés quasi stationnaires). Elles sont utilisées pour la détection de changements graduels avec des seuils de détection faibles. Les informations fournies par le nombre croissant de capteurs installés sur les procédés rendent très difficile l'analyse des résultats. L'analyse en composantes principales (ACP) et les moindres carrés partiels (MCP) permettent de réduire le nombre de variables à traiter par la détermination de relations linéaires entre elles (variables latentes), permettant ainsi d'expliquer la variance dans des séries de données.

L'ACP et MCP ont été avec succès appliqués pour résoudre des problèmes dans l'ingénierie de procédés. Par exemple, *D. Neogi & al (1998)* [66] ont analysé les traitements de données par l'émulsion d'un processus batch utilisant MCP. *J. Zhang & al. (1996)* [67] les ont adoptés pour la détection et le diagnostic de défaut. *J.G. Chen & al. (1996)* [68] ont décrit l'application de l'ACP pour identifier des régions normales dans la surveillance des processus statistiques multivariés.

L'ACP est basée essentiellement sur une décomposition orthogonale de la matrice de covariance des variables du processus le long des directions qui expliquent la variation maximale des données, c'est-à-dire que cette méthode recherche une projection des observations sur des axes orthogonaux. De ce fait, le premier axe contient la plus grande variation. Le deuxième axe contiendra la seconde plus grande variation orthogonale au premier.

Le but de l'ACP est donc de trouver un ensemble de facteurs (composantes) qui ait une dimension inférieure à celle de l'ensemble original de données et qui puisse décrire correctement les tendances principales. L'ACP est une procédure qui ne prend en compte que les variables du processus. Parfois, un ensemble additionnel de données est disponible, e.g variable de qualité du produit dans un réacteur chimique. Il est souhaitable d'inclure toutes les données disponibles pour la surveillance du procédé et d'utiliser de cette façon les variables du processus pour prédire et détecter des changements dans les variables de qualité du produit. Pour cela, la méthode des moindres carrés partiels peut être utilisée. Cette méthode modélise le rapport entre deux blocs de données tout en les comprimant simultanément. Elle est employée pour extraire les variables latentes qui expliquent la variation des données du processus.

Divers travaux menés par *J. F. MarcGregor & al.(1994)* [69] (1995) [70] ont montré l'application des méthodes statistiques multi-variables telles que les ACP et MCP, dans l'analyse et la commande de processus, la détection et le diagnostic de défaillances, aussi bien dans le cas de procédés continus que dans les cas des procédés « batch » (continus par lots)

Une limitation importante de la surveillance basée sur l'ACP est que la représentation obtenue est invariante dans le temps, tandis que la plupart des processus réels évoluent au

cours du temps. Par conséquent, la représentation issue de l'ACP nécessite également d'être mise à jour périodiques. Un autre inconvénient est qu'elle ne possède pas des propriétés de signature pour le diagnostic, ce qui rend l'isolation des défaillances difficile.

1.3.2.2 Réseaux de neurones artificiels (RNA)

Un RNA est un système informatique constitué d'un nombre de processeurs élémentaires (ou nœuds) interconnectés entre eux qui traite, de façon dynamique, l'information qui lui arrive à partir des signaux extérieurs. De manière générale, l'utilisation des RNA se fait en deux phases. Tout d'abord, la synthèse du réseau comprend plusieurs étapes : le choix du type de réseau, du type de neurones, du nombre de couches, des méthodes d'apprentissage. L'apprentissage permet alors, sur la base de l'optimisation d'un critère, de reproduire le comportement du système à modéliser. Il consiste dans la recherche des poids de paramètres et peut s'effectuer de deux manières : supervisé (le réseau utilise les données d'entrée et de sortie du système à modéliser) et non supervisé (seules les données d'entrée du système sont fournies et l'apprentissage s'effectue par comparaison entre exemples). Quand les résultats d'apprentissage obtenus par le RNA sont satisfaisants, il peut être utilisé pour la généralisation. Il s'agit ici de la deuxième phase où de nouveaux exemples, qui n'ont pas été utilisés pendant l'apprentissage, sont présentés au RNA pour juger de sa capacité à prédire les comportements du système ainsi modélisé. Leur faible sensibilité aux bruits de mesure, leur capacité à résoudre des problèmes non linéaires et multi-variables, à stocker les connaissances de manière compacte, à « apprendre » en ligne et en temps réel, sont des propriétés qui rendent l'utilisation des RNA fréquente. Leur usage peut alors se faire à trois niveaux :

- comme modèle du système à surveiller en état normal et générer un résidu d'erreur entre les observations et les prédictions,
- comme système d'évaluation de résidus pour le diagnostic,
- ou comme système de détection en une seule étape (en tant que classificateur), ou en deux étapes (pour la génération de résidus et le diagnostic).

Plusieurs travaux ont été réalisés dans la littérature pour développer des méthodes de diagnostic des processus chimiques, se basant sur les différentes informations disponibles pour décrire le comportement des systèmes. *E.M. Assaf et al (1990)* [65] et *J. A. Barton (1984)* [71] ont présenté les résultats donnés par le modèle neural pour des situations possibles d'emballement thermique du processus fortement exothermique. L'objectif est d'établir un algorithme fiable d'alarme pour la détection et la prévention rapide de cette situation. Donc, les résultats prouvent que le modèle neural de NARMAX est représentatif pour le comportement dynamique du processus chimique non linéaire. Des expériences ont été exécutées dans un réacteur échangeur et des données expérimentales ont été utilisées pour définir et valider le modèle. Puis, l'essai de la somme cumulative est appliqué pour indiquer n'importe quelle

dérive du comportement normal du processus. Le comportement anormal du processus dû à deux défauts dans ses paramètres de commande a été examiné. En effet, chaque défaut a été provoqué par une variation brusque dans le débit du refroidissement. Notons bien que les défauts les plus fréquents sont dus à une chaleur insatisfaisante de refroidissement, mauvaise connaissance des conditions de fonctionnement, la présence des impuretés, défaillance des équipements auxiliaires (régulateur, actionneur, capteur, ...) et apparition des événements indésirables. Gustin a établi une classification des causes thermiques d'emballement dans les réacteurs *J. L. Gustin. (1996) [72]* où la perte de la capacité de refroidissement est la plus importante cause du déclenchement de l'emballement thermique.

Le diagnostic de défaut à l'aide du RN à base des fonctions radiales avec une couche cachée peuvent être appliqués pour développer une représentation non linéaire du réacteur de polymérisation basé sur une structure récurrente *D. L. Yu & al. (1999) [73]*. Dans la première étude de cas d'un réacteur en batch, un défaut capteur de température et un encrassement de double enveloppe sont étudiés et classifiés avec succès utilisant le modèle de processus neural et un classificateur neural de RBF. La capacité de RNAs d'extraire l'information directement à partir des données disponibles sur le processus peut être le motif le plus important d'appliquer cette approche dans l'industrie. Elles sont utiles dans les problèmes tels que l'analyse de données de capteur, qui sont au delà de la portée des techniques conventionnelles de système expert algorithmique. Les possibilités de diagnostic des défauts multiples (se produisant deux, trois à la fois) sont également étudiées. Le réseau de neurones peut diagnostiquer bien les doubles défauts par rapport aux défauts triples.

Dans les processus industriels, RNAs ont été appliqués pour la détection et le diagnostic de défaut. Par exemple, *A.F. Cubillos & al. (1998) [74]* ont décrit un système hybride adaptatif établi sur la connaissance antérieure et les réseaux de neurones pour modéliser des stratégies de régulation de processus et des paramètres incertains dans un réacteur continu fortement non linéaire. *Y. Power & al. (2004) [75]* ont décrit un cadre de surveillance en deux étapes de diagnostic de défaut utilisant les réseaux de neurones. Basé sur ce cadre, un système de détection de défaut a été mis en application pour identifier l'endroit exact des défauts et pour les diagnostiquer.

RNAs ont fait des développements rapides dans le diagnostic de défaut des processus chimiques et des domaines connexes. La détection de défaut de processus par des techniques d'intelligence artificielle a été étudiée par *V. Venkatasubramanian & al. (1990) [76]*, *J. C. Hoskins & al. (1988) [8]* et *K. Watanabe & al. (1994) [77]*. *P. Hugo & al. (1988) [78]* a conclu qu'en ce qui concerne le problème d'exploitation sûre dans la réaction, les réacteurs doivent atteindre la température désirée, qui peut finir avec des réactions secondaires ou un emballement possible.

Les méthodes à base de réseaux de neurones ont suscité beaucoup d'attention en raison

de leur exécution rapide et robuste, leur capacité pour la reconnaissance des structures et l'association. Le problème de diagnostic de défaut peut être interprété comme tâche de reconnaissance des structures. Alors que, les limites résident dans la nécessité d'une base de données importante et la présence d'un procédé réel, ce qui n'est pas toujours disponible surtout dans le cas de l'apprentissage des modes défaillants.

1.3.2.3 Reconnaissance de formes

La reconnaissance des formes regroupe l'ensemble des méthodes permettant la classification automatique d'objets, suivant sa ressemblance par rapport à un objet de référence. L'objectif est de décider, après avoir observé un objet, à quelle forme type celui-ci ressemble le plus. Une forme est définie à l'aide de p paramètres, appelés descripteurs, qui sont les composantes d'un vecteur forme que nous noterons X .

La résolution d'un problème de reconnaissance de formes nécessite :

- la définition précise des l classes entre lesquelles va s'opérer la décision. Cette étape est liée à la nature des objets à classer et est donc spécifique au problème posé.

- le choix d'un jeu de caractères pertinents pour la discrimination des vecteurs de formes. Malheureusement, il n'existe pas de méthodes systématiques permettant de choisir les paramètres les plus appropriés à la résolution d'un problème donné. Par conséquent, seule une bonne connaissance du problème à résoudre peut permettre un choix adéquat des paramètres de forme (ou descripteurs). Notons enfin que le nombre de caractères fixe la dimension de l'espace de représentation et, par conséquent, la quantité des calculs à mener.

Ceci peut représenter une contrainte sévère dans un contexte de traitement en temps réel des objets à classer.

- l'élaboration d'un classificateur permettant l'affectation d'une forme observée à l'une des classes. Le classificateur est généralement établi à l'aide d'un ensemble d'apprentissage constitué de formes pour lesquelles on connaît l'appartenance aux différentes classes.

Les méthodes présentées précédemment sont complémentaires entre elles. Il n'est donc pas étonnant de trouver des applications où les différents niveaux de traitement (signaux, modèles et connaissance experte) soient intégrés dans une même structure.

D'autres articles traitent du domaine du diagnostic de défauts basé sur des modèles P . *M. Frank & al. (2000) [79]*, sur le diagnostic de défauts par extraction de caractéristiques et classification de problèmes (défauts). La classification des défauts est examinée par *M. A. Kramer & al. (1993) [80]* selon trois catégories principales :

- i) Reconnaissance de formes : ici sont traitées les méthodes basées sur l'historique du processus.

- ii) Modèles basés sur le raisonnement : ils utilisent les techniques basées sur des modèles qualitatifs.

iii) Modèles causaux : dans ce cas, les techniques de recherche de symptômes en utilisant différents modèles sont traités.

Une autre méthodologie de diagnostic de défaillances à prendre en compte est celle basée sur des modèles à événements discrets (SED) *S. Lafortune & al. (1991)* [81] et sur le concept de diagnostiqueur, lesquels permettent tant l'analyse hors ligne, qu'en ligne de la diagnosabilité des systèmes, relative à des défaillances qui peuvent se produire dans les processus. Le système de diagnostic a comme objectif détecter la cause de quelques situations (états fonctionnels) du procédé, en un temps fini, comme la conséquence d'une défaillance. Tant les SED que le diagnostiqueur sont des machines à états finis (MEF). La méthodologie du diagnostic à base de modèles à événements discrets est applicable sur beaucoup de systèmes industriels *M.Sampath & al. (1994)* [82]. Toutefois, malgré son intérêt notable, elle présente l'inconvénient des systèmes partiellement observables, dans le sens de l'inévitable augmentation exponentielle des états produits au fur et à mesure qu'on incorpore de nouveaux modèles de dispositifs qui forment des parties du système ou que s'ajoutent de nouvelles situations de défaillance.

Un des points les plus importants dans les méthodes de reconnaissance de formes, est le bon choix de l'espace de représentation, car de celui-ci dépend la qualité du résultat. Malheureusement, il n'existe pas de règle générale pour choisir l'espace de représentation, ce choix s'appuie sur les connaissances a priori existantes sur le problème à résoudre ; il n'y a pas de démarche algorithmique qui permette de le formaliser.

Un des inconvénients d'utiliser les méthodes de reconnaissance des formes pour le diagnostic est que, en général, le nombre de classes est supposé connu au départ, i.e. la connaissance est supposée exhaustive. Toute observation doit appartenir à une des classes définies. Ceci est loin d'être le cas dans le contexte du diagnostic. Par ailleurs, il reste souvent des modes de fonctionnement dont nous ignorons les caractéristiques.

Dans ce cas, il est nécessaire d'utiliser des techniques qui permettent de prendre en compte la détection de nouvelles classes, d'apprendre leurs caractéristiques et de les inclure dans le système de détection ; ce qui implique qu'un système de diagnostic basé sur des méthodes de reconnaissance de formes doit être un système évolutif, capable de prendre en compte tout nouveau phénomène normal ou anormal présent dans le processus surveillé.

1.3.2.4 Système expert

Une autre alternative pour la modélisation des systèmes complexes est l'utilisation des concepts de la théorie des ensembles flous et de la logique floue *S. Dash & al. (2003)* [83]. Un modèle flou est une représentation des caractéristiques d'un système à l'aide de règles floues qui décrivent son comportement. Ceci permet une généralisation de l'information qui essaie d'imiter le raisonnement approximatif exécuté par l'homme en introduisant l'imprécision.

La structure de base d'un SIF est constituée d' :

a. un univers de discours qui contient les fonctions d'appartenance des variables d'entrée et de sortie à des classes. Ces fonctions peuvent avoir différentes formes, les plus usuelles étant les formes triangulaires, trapézoïdales et gaussiennes,

b. une base de connaissance qui regroupe les règles liant les variables d'entrée et de sortie sous la forme « SI. . .ALORS »,

c. un mécanisme de raisonnement qui base son fonctionnement sur la logique du modus ponens généralisé.

Les formalismes les plus utilisés pour les SIF sont ceux de *E. Mamdani. (1977)* [84] et de *T. Takagi & al. (1985)* [85].

La surveillance des systèmes industriels est devenu depuis les deux dernières décennies un des domaines privilégiés d'applications pour les systèmes experts ou systèmes à base de connaissances. En effet, ils possèdent la propriété essentielle de pouvoir restituer à des non experts. Dans la plupart des cas, les connaissances utilisées pour le développement d'un système expert d'aide au diagnostic reposent sur l'apprentissage des relations entre les causes et les effets observées pour chaque défaillance. Avec ce mode de connaissance, les systèmes experts d'aide au diagnostic appartiennent à la famille des méthodes sans modèles. Cependant, l'utilisation de modélisation fonctionnelle décrivant les comportements détaillés des composants de systèmes complexes permet également le développement de systèmes experts appartenant à la famille des méthodes de diagnostic à base de modèles *S. Dash & al. (2003)* [83].

Un système expert est composé de deux parties indépendantes (voir Fig 1.10) :

- une base de connaissances elle-même composée d'une base de règles qui modélise la connaissance du domaine considéré et d'une base de faits qui contient les informations concernant le cas traité,

- un moteur d'inférences capable de raisonner à partir des informations contenues dans la base de connaissances, de faire des déductions, etc. Au fur et à mesure que les règles sont appliquées des nouveaux faits se déduisent et se rajoutent à la base de faits.

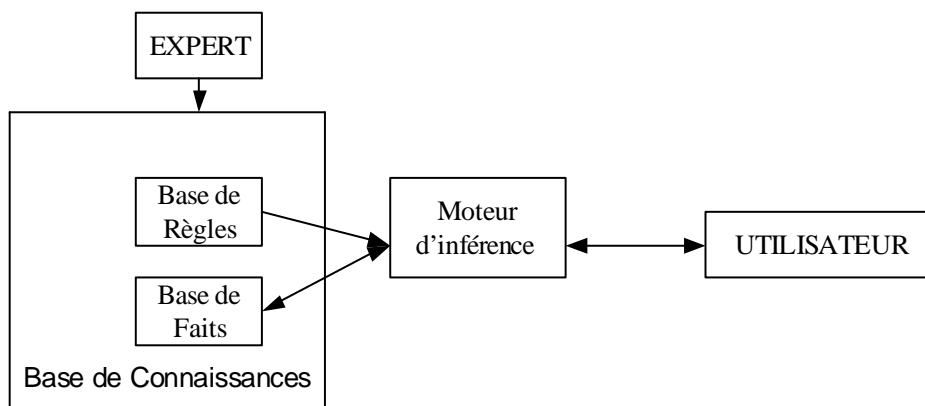


FIG. 1.10 – Architecture d'un système expert.

Les principaux avantages des systèmes experts pour le diagnostic sont leur capacité à raisonner sous incertitudes et leur capacité à apporter des explications des solutions fournies. La difficulté spécifique de leur mise en œuvre est la formalisation de la démarche cognitive qui a pour objectif, à partir d'une situation donnée, de définir et décrire le raisonnement associé.

1.3.3 Méthodes de prévention des risques

Les études menées depuis une quinzaine d'années ont conduit à l'élaboration de méthodologies permettant la mise au point de modes opératoires adaptés aux contraintes fonctionnelles et de sécurité de installations chimiques (réacteurs tubulaires, réacteurs continus, batch et semi-batch...ect).

Toutefois, les réacteurs, même s'ils offrent les caractéristiques de flexibilité et de polyvalence requises, présentent un certain nombre de limitations technologiques. En particulier, les mauvaises conditions d'évacuation de la chaleur dégagée par les réactions chimiques posent un grave problème de sécurité. Alors, différents facteurs tels que la complexité du système, la dimension élevée, la non linéarité des processus ont souvent rendu très difficile la détection des risques d'accidents (très) graves, voire majeurs: incendies et/ou explosions, intoxications, brûlures chimiques, pollutions, . . . *A. Laurent. (2003) [86].*

Tous ces éléments mettent clairement en évidence la nécessité, toujours actuelle, de développer des techniques adaptées à la prévention du risque chimique et explique l'intérêt croissant de la recherche sur les problématiques de sécurité. Cela a notamment contribué à l'élaboration et l'amélioration de nombreuses méthodes et outils qui sont aujourd'hui reconnus et très utilisés dans le monde industriel *A. K. Coker (2001) [87].* Pour répondre à ces besoins, une méthodologie pour l'étude et le contrôle du risque d'emballement thermique et d'apparition des réactions secondaires a été formalisée dans cette thèse.

1.3.3.1 Méthodologies d'analyse des risques

Afin de prévenir les risques associés à un procédé, un certain nombre de méthodologies ont été développées pour procéder à une analyse systématique des risques et de leurs conséquences *A.E.P. Brown (1999) [88]*. Ces méthodologies servent à mettre en évidence toutes les sources de dangers, à identifier les risques posés par les éléments du système et leurs interactions, à anticiper des dérives et mettre en place des mesures de sécurité (ou barrières dans le cas d'accidents majeurs), pour d'une part éviter que ces déviations apparaissent et d'autre part en limiter les conséquences dans les cas où cette déviation ne pourrait être corrigée. L'application de méthodes d'analyse de risques permet donc de regrouper un certain nombre de données dans le but de maintenir à tout instant l'installation en sécurité que ce soit en fonctionnement normal ou en marche dégradée.

Dans [89], *J. Tixier & al. (2002)* a comparé de nombreuses méthodologies disponibles dans l'industrie et relatives au risque chimique et au transport de matières dangereuses. Ces techniques s'articulent toutes autour de trois phases :

- une phase d'identification : cette phase essentielle consiste à décrire l'installation à analyser en termes d'activités dangereuses, de produits et d'équipement. Plus cette phase sera détaillée, plus l'analyse des risques sera exhaustive.

- une phase d'évaluation des risques établis dans la phase précédente, réalisée dans le but de quantifier ces risques. Cette phase peut se faire deux manières complémentaires :

- en évaluant les dommages conséquents à ces risques (approche déterministe),
- en évaluant la probabilité d'occurrence du risque (approche probabiliste).

- une phase de hiérarchisation suite à l'évaluation des risques de manière à établir un ordre de priorité quant au traitement de ces risques.

Dans l'industrie chimique, on recense trois méthodes principalement disponibles dans la littérature et utilisées en cas de risque *F.I. Khan & al. (2003) [90]* :

- L'analyse préliminaire des risques,
- Les méthodes déductives (arbres des défaillances et arbre de cause),
- Les méthodes inductives (HAZOP, AMDEC).

Dans cette partie seront détaillées les méthodes les plus usuelles et les plus pertinentes en matière d'analyse de risques pour mettre en avant leurs besoins et leurs finalités.

Analyse préliminaire des risques L'analyse préliminaire des risques constitue un processus continu dans les différentes étapes d'un projet depuis le stade de la recherche jusqu'aux études de base et couvrant donc les étapes de faisabilité et d'avant projet. Elle permet d'identifier les inconvénients, dangers et risques liés aux différents produits mis en œuvre (réactifs, produits, intermédiaires...) et à leurs propriétés intrinsèques et les risques liés aux procédés (réactions chimiques principales et secondaires...) et aux équipements et technologies utilisés

et étudier les mesures préventives et compensatoires nécessaires. A titre d'exemple, l'analyse préliminaire des risques des dangers liés aux substances aux mises en œuvre préconise d'identifier les dangers liés à la toxicité, l'inflammabilité, la stabilité et la réactivité de tous les produits intervenants dans la réaction considérée.

Cette méthode d'analyse des risques est intéressante pour son caractère relativement simple et général. C'est pourquoi elle est presque systématiquement mise en œuvre au préalable des autres méthodes. De plus, elle s'intègre parfaitement dans les premières phases de conception d'un procédé et peut-être enrichie tout au long de son évolution.

Méthodes déductives Une méthode est dite déductive si elle cherche les causes d'un événement non souhaité. Les plus connues et les plus utilisées sont les méthodes dites de l'arbre de décision (ou des causes).

Arbre de défaillance (Arbre de cause) C'est l'un des outils d'analyse du risque technologique, développé au début des années 1960 aux Etats-Unis. C'est la méthode la plus couramment utilisée dans analyses de fiabilité, de disponibilité ou de sécurité des systèmes.

Il s'agit d'une méthode optimisée qui permet la détermination des chemins critiques dans un système. Cette méthode a pour objet de déterminer les diverses combinaisons possibles d'événements qui entraînent la réalisation d'un événement indésirable unique. Elle permet donc d'identifier les points faibles de la conception.

C'est une méthode déductive dont la représentation graphique des combinaisons est réalisée par une structure arborescente (arbre), permettant un traitement à la fois qualitatif et quantitatif. Cet arbre est établi sous forme d'un diagramme logique et comporte au sommet l'événement indésirable. Les causes immédiates qui produisent cet événement sont ensuite hiérarchisées à l'aide de symboles logiques « ET » et « OU ». Une extension des arbres de défaillances est la méthode du diagramme de causes-conséquences. Cette méthode combine les principes utilisés par l'analyse déductive de l'arbre des défaillances et l'analyse inductive de l'arbre des conséquences. Les arbres de décision sont largement utilisés en contexte industriel pour déterminer des symptômes qui peuvent être de diverses natures.

Potentiellement, il est possible de diagnostiquer des défauts multiples en garantissant les diagnostics obtenus. Néanmoins, la garantie requiert que l'arbre de décision soit complet et que toutes les situations soient représentées, y compris les défauts multiples. Or, pratiquement, la combinatoire est telle qu'il est irréaliste d'atteindre cette complétude. Pratiquement, les arbres de décision ne garantissent donc pas que la situation réelle appartienne nécessairement aux diagnostics déduits.

Ces arbres de décision pour le diagnostic présentent un certain nombre d'avantages :

- ils peuvent être facilement compris

– ils sont encore utilisés par les services de maintenance pour décrire des procédures de résolution de problèmes

- ils peuvent être utilisés pour représenter un large champ de problèmes de diagnostic

Par la suite, ce principe de diagnostic a été perfectionné, en permettant par exemple d'analyser des systèmes très complexes et en permettant une analyse croisée de plusieurs arbres de défauts pour résoudre un même problème.

Cependant, le principal inconvénient des arbres de défaillances est que le développement est sensible aux erreurs à différentes étapes. En effet, l'arbre construit est seulement aussi bon que le modèle mental de son créateur. Pour exécuter un diagnostic correct à partir des arbres de défaillances, ceux-ci doivent largement représenter toutes les relations causales du processus, c'est-à-dire qu'ils doivent être capables d'expliquer tous les scénarios de défauts possibles. De plus, l'emploi de cette méthode se révèle difficile pour les systèmes fortement dépendants du temps. Enfin, il n'y a pas de méthode formelle pour vérifier l'exactitude de l'arbre développé.

Méthodes inductives À l'opposé des méthodes déductives, une méthode est dite inductive si elle cherche les conséquences d'un événement non souhaité. Les méthodes les plus utilisées et que nous présentons ici sont l'AMDEC *H. Lawley. (1974)* [91] et l'HAZOP [92].

Diverses méthodes d'analyse de risque (Hazop, Dylam, etc.) peuvent être utilisées pour identifier les événements principaux ou les déviations potentiellement dangereuses. Puis, des corrections doivent être faites à l'installation. Malheureusement, malgré l'optimisation de mode d'opération, il n'est pas possible d'empêcher l'apparition de défauts pendant la réaction chimique. Ces défauts sont peut-être dus aux origines chimiques, défauts dans l'équipement ou dans le système de contrôle. En effet, dans *Y. Chetouani (2006)* [36], deux défauts dans un réacteur chimique semi-batch parfaitement agité, se produisant à un moment inconnu, sont expérimentalement réalisés. Chaque défaut est provoqué par une variation brusque en valeur d'un des paramètres suivants : la température de refroidissement et le débit d'alimentation du réactif. Le but est de détecter la présence des changements brusques, et indiquer exactement le moment où il se produit. L'évolution d'information produite par l'évaluation d'état est observée et discutée, aussi bien que le retard dans la détection selon le seuil de décision. Un logiciel de surveillance permet l'ajustement précis des paramètres. Les paramètres présentés dans le système de surveillance sont les modes de commande de la température de la réaction (isotherme ou pente de la température) et du fluide (constante ou pente de la température). Dans cette application, la méthode de détection de défaut est basée sur un essai appliqué à la température de la masse de réaction qui représente le paramètre à surveiller. Ce paramètre est essentiel parce qu'il est le résultat de tous les effets de défauts et des paramètres expérimentaux présentés (introduction d'écoulement, taux de mélange, écoulement de refroidissement, etc.).

En effet, la température de la masse de réaction est l'image de la dynamique dans le cas de l'absence de défaut ou de la présence de défaut. D'ailleurs, cette température est une mesure accessible dans tous les réacteurs chimiques.

Souvent, les modèles cinétiques détaillés ne sont pas toujours approprié aux états en ligne/aux applications d'évaluation de paramètres en raison de leurs caractéristiques numériques. Ainsi, le développement des estimateurs de concentration doit se fonder sur l'adoption des lois cinétiques simples mais par représentant de taux mises en bloc.

Analyse des Modes de Défaillances et de leurs Effets (AMDE) L'analyse des modes de défaillances et de leurs effets (AMDE) (*en anglais : Failure Mode and Effect Analysis FMEA*) est une technique issue du domaine de la fiabilité. Elle repose sur la notion de mode de défaillance, définie comme l'effet par lequel une défaillance est observée sur un élément du système. Les défaillances d'un composant ont des effets sur les fonctions de ce dernier ; le mode de défaillance est dénommé du nom de l'effet.

La démarche de cette technique consiste d'abord à définir le système, ses fonctions et ses composants. Ensuite, l'ensemble des modes de défaillances des composants doit être établi. Pour chaque mode de défaillance, sont recherchées ensuite les causes possibles de son apparition. Finalement, une étude des effets sur le système et sur l'opérateur est faite pour chaque combinaison (cause, mode de défaillance). Les résultats sont présentés sous forme de tableau.

L'AMD est parfois complétée par une analyse de criticité ; elle devient AMDEC (Analyse de Modes de Défaillance, de leurs effets et de leur Criticité). La criticité permet d'extraire les modes de défaillance les plus critiques. L'analyse de criticité est évaluée à partir du couple probabilité-gravité.

En résumé, l'AMDE est très répandue dans des nombreux domaines industriels. En effet, il est nécessaire d'identifier a priori les défauts et/ou les dysfonctionnements pouvant apparaître, à un certain moment, dans le système supervisé ; le recensement préalable des défaillances et leurs relations éventuelles ne peuvent jamais être exhaustif et requiert en général une réécriture du tableau. Enfin, cette méthode ne peut pas traiter les cas de défaillances multiples et intégrer l'aspect fonctionnel. Une telle défaillance dite "de mode commun" est due à des pannes survenant simultanément dans différents composants du système, une même cause étant à l'origine de ces pannes.

Méthode HAZOP Dans la plupart des pays industrialisés, les normes exigent que l'analyse de risque soit exécutée de façon régulière. HAZOP est le plus employé couramment et reconnu comme approche préférée dans l'industrie de transformation chimique. Il est typiquement exécuté par une équipe d'experts ayant spécialisé la connaissance et l'expertise dans la conception, opération et entretien de l'usine. HAZOP est également l'une des méthodes d'identification de risque les plus puissantes disponibles et a été bien décrit dans la litté-

ture. L'analyse de HAZOP permet de produire du « si ... alors » des règles pour le système de logique floue (SLF) et de déterminer l'information à envoyer à d'autres niveaux dans le système d'information. on note que toutes les variables considérées dans l'analyse de HAZOP ne sont pas des mesures de l'usine, on peut observer quelques variables (prévues). Concernant la génération de « si ...alors » de règles, seulement les variables mesurées et observables sont considérées.

L'HAZOP (HAZard and OPerability Study) a été initialement développée par la société "Imperial Chemical Industries" au début des années 1970 et s'applique à l'industrie chimique. Cette méthode d'analyse est adaptée à l'étude de dysfonctionnement des circuits thermohydrauliques. Elle a pour objectif l'identification des risques et l'étude de leur prévention/protection en s'appuyant sur un modèle physique du système et en étudiant chacune des déviations possibles.

Sa mise en œuvre consiste à définir tout d'abord les phases de vie du système et pour chacune d'elle les paramètres caractéristiques (pression, débit, température, niveau, concentration ect.). Elle requiert notamment l'examen de schémas et plans de circulation des fluides instrumentés ou schémas PID (Piping and Instrumentation Diagram). Il s'agit ensuite d'étudier les dérives possibles de ces paramètres à l'aide de mots-guides : 'pas', 'pas assez', 'trop'. Puis, dans chaque cas, on étudie les causes de ces dérives, leurs conséquences, leur niveau de gravité, les moyens de détection, la ou les actions correctives existantes qui permettent de ramener le système dans un état satisfaisant de sécurité *F.I. Khan & al. (2003) [90]*.

L'HAZOP est un outil particulièrement efficace pour les systèmes faisant intervenir des circulations de fluide. Cette méthode présente tout comme l'AMDEC un caractère systématique et méthodique.

Considérant, de plus, simplement les dérives de paramètres de fonctionnement du système, elle évite de considérer, contrairement à l'AMDEC, tous les modes de défaillances possibles pour chacun des composants du système. En revanche, l'HAZOP permet difficilement d'analyser les événements résultant de la combinaison simultanée de plusieurs défaillances. Par ailleurs, il est parfois difficile d'affecter un mot guide à une portion bien délimitée du système à étudier. Cela complique singulièrement l'identification exhaustive des causes potentielles d'une dérive. En effet, les systèmes étudiés sont souvent composés de parties interconnectées si bien qu'une dérive survenant dans une ligne ou maille peut avoir des conséquences ou à l'inverse des causes dans une maille voisine et inversement. Bien entendu, il est possible a priori de reporter les implications d'une dérive d'une partie à une autre du système. Toutefois, cette tâche peut rapidement s'avérer complexe.

Cependant, le point faible de l'HAZOP vient de son analyse qui repose sur la description par flux : on ne tient pas compte des défaillances des entités du système. D'autre part, les enchaînements de déviations ou les déviations simultanées ne sont également pas étudiées.

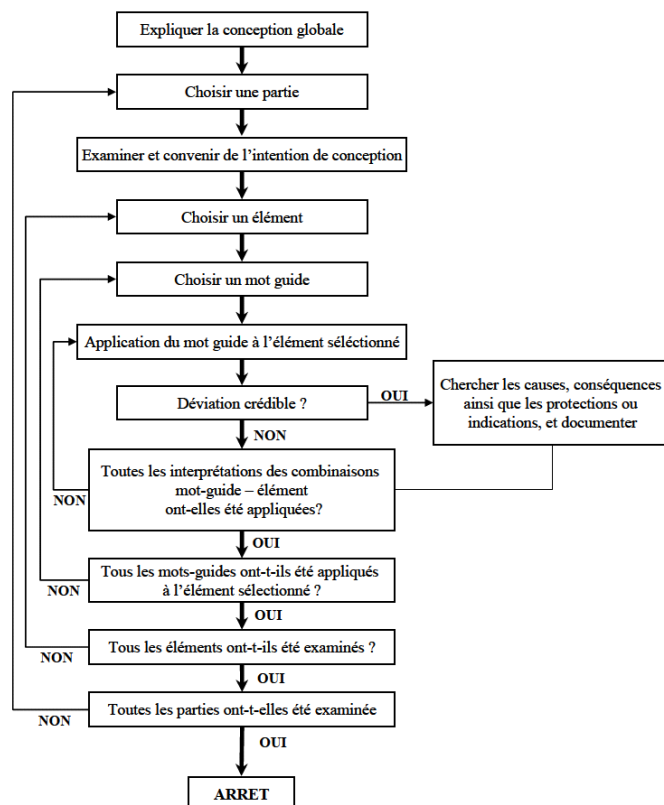


FIG. 1.11 – Organigramme de la procédure de l'examen HAZOP.

1.3.3.2 Méthodes expérimentales d'évaluation des risques

Parmi les outils développés spécifiquement pour la prévention du risque chimique, la calorimétrie est sans doute l'une des techniques les plus utilisées à l'heure actuelle dans les laboratoires de sécurité des procédés. La première application dans l'industrie chimique se situe dans les années 60 et consiste en l'évaluation de vitesses de réaction W . *Regenass (1997)* [93]. Depuis, de nombreux utilisateurs ont contribué à l'évolution des appareils et méthodes pour une détermination plus précise et plus large de paramètres cinétiques et thermiques F . *Stoessel. (1997)* [94] *J. Steinbach. (1999)* [95].

Faisant intervenir des appareils calorimétriques permettent ensuite de déterminer expérimentalement le comportement et la stabilité thermique des produits à partir de l'évolution du flux de chaleur, en fonction de la température. Ces techniques calorimétriques renseignent à la fois sur les conditions de manipulation et de stockage des produits purs mais peuvent également orienter le choix de conditions opératoires lors de la mise en œuvre de ces produits dans un système réactionnel. Par exemple, l'intégration des courbes de flux de chaleur donne

accès à l'énergie dégagée au cours de la décomposition du produit et elle donne aussi

- la température correspondant à la température d'initiation de la réaction de décomposition aussi appelée température de début de décomposition,
- la température qui correspond au maximum du pic de décomposition c'est-à-dire lorsque le flux de chaleur est maximum,
- la chaleur dégagée au cours des réactions de décomposition.

Selon Sotoessel *F. Stoessel. (1993) [96]*, une réaction de synthèse doit être étudiée au laboratoire à très petite échelle par analyse thermique différentielle, afin de détecter l'existence de réactions secondaires éventuellement présentant une forte exothermicité (décomposition, par exemple). Les quantités de chaleur libérée par diverses réactions possibles, lorsque la température est augmentée, peuvent ainsi être mesurées et l'analyse des résultats permet de calculer globalement une énergie d'activation et une différence de température adiabatique.

Les concepts et paramètres associés au scénario d'emballement thermique permettent de procéder à une évaluation du risque thermique et de mettre en place des mesures préventives adaptées selon la classe de criticité identifiée : ajustement des conditions opératoires, modifications des équipements, dimensionnement d'événements, etc. . . Toutefois, cette étude ne peut être menée sans une connaissance précise des caractéristiques thermique et cinétique de la réaction de synthèse d'une part, et de la réaction de décomposition d'autre part [86]. Ces données sont généralement obtenues à partir de mesures calorimétriques *F. Stoessel. (1997) [96]*.

On rappelle que la prévention de l'emballement nécessite :

- d'une part, la connaissance précise du comportement et de l'évolution des milieux réactionnels pour des fonctionnements normaux et dégradés,
- d'autre part, l'étude de la stabilité des milieux réactionnels aux températures obtenues lors d'un fonctionnement dégradé.

1.4 Analyse Structurelle pour la surveillance robuste des systèmes réactifs

1.4.1 Analyse Structurelle

L'analyse structurelle est un outil puissant, performant et est bien adaptée pour la conception de systèmes de surveillance des processus chimiques. Elle permet de déterminer de nombreuses propriétés d'un système, qui sont obtenues à partir de la seule connaissance de l'existence de liens entre les composants d'un système sans que les modèles de comportement détaillés soient nécessaires. Quelques représentations structurelles permettent de visualiser clairement certaines propriétés sur des systèmes de taille raisonnable les systèmes physiques, tels que la matrice structurelle, le graphe biparti, le digraphe et le bond graph. On utilise également des outils de représentation par graphe pour le diagnostic de défauts (couplage,

décomposition de Dulmage-Mendelsohn), afin d'analyser les propriétés des systèmes qui pourront être servies pour la conception des relations de redondance analytique ou le placement de capteurs.

L'analyse du modèle structurel, ou analyse structurelle, a été largement utilisée par les différentes communautés en automatique : surveillance (FDI), intelligence artificielle (DX) ou l'intégration des deux approches (bridge) afin de déterminer les propriétés des systèmes relatifs à la détection et à la localisation des défaillances *E. Frisk & al. (2009)* [97]. Ces communautés ont développé des méthodes pour la conception de relations de redondance analytique (RRAs) pour le diagnostic de défauts. On se concentre particulièrement sur les méthodes basées sur la recherche de couplages dans un graphe biparti *M. Blanke & al. (2003)* [98] et (2006) [99], le retrait consécutif de capteurs *L. Travé-Massuyès & al. (2006)* [100] et la décomposition Dulmage-Mendelshon *M. Krysander & al. (2008)* [101]. Le travail de *A. A. Yassine & al. (2007)* [102] apporte une approche structurelle pour la conception des sous-systèmes testables permettant de détecter les défauts dans les systèmes à diagnostiquer. On peut aussi citer des méthodes basées sur la conception de conflits *B. Pulido & al. (2002)* [103] et (2004) [104] issue de la communauté de l'intelligence artificielle.

Un algorithme permettant de trouver les couplages complets est présenté dans *M. Blanke & al. (2006)* [99]. Ces relations de redondance sont composées des chaînes alternées, qui commencent par des flots de données et qui finissent par des contraintes non couplées. Concernant cette méthode, on a remarqué que certaines RRAs sont trouvées de nombreuses fois : il y a donc des redondances dans les calculs. Le nombre de redondances résultant dépend du nombre de couplages possibles. Ceci représente l'inconvénient majeur de cette méthode.

L. Travé-Massuyès & al. (2006) [100] ont proposé une méthode pour la conception de RRAs. L'idée principale de cette méthode est d'utiliser le modèle du comportement du système pour analyser d'une façon approfondie les redondances analytiques introduites par les capteurs hypothétiques. La conception des relations de redondance analytique hypothétique (H-RRAs) permet de construire une matrice de signature de défauts hypothétique (HFS matrice). Le point de départ de cette méthode est de faire l'hypothèse que toutes les variables du système sont mesurées. On procède alors aux retraits consécutifs de capteurs. Cette méthode est la continuation des travaux proposés dans *L. Travé-Massuyès & al. (2001)* [105] et (2003) [106]. Le travail effectué dans [105] s'appuie sur une interprétation causale et, par conséquent, il n'y a pas de garantie que toutes les relations de redondance analytique (RRAs) peuvent être trouvées. Mais la méthode [100] traite toutes les interprétations causales possibles des relations du modèle du système et par conséquent, toutes les RRAs peuvent être obtenues. Cette méthode consiste à retirer toutes les combinaisons possibles des variables, alors sa complexité devient exponentielle par rapport aux variables.

L'article de *M. Krysander & al. (2008)* [101]. comprend un algorithme, basé sur la décom-

position de Dulmage-Mendelshon, pour la détermination des sous-systèmes sur-déterminés minimaux (les sous-systèmes testables minimaux) afin de générer les RRAs. Les résultats présentés dans [101] sont l'extension des résultats présentés dans *M. Krysanter & al. (2005)* [107]. La complexité de cet algorithme dépend de l'ordre des redondances structurelles c'est-à-dire de la différence entre le nombre d'équations et le nombre de variables. Cette complexité est inférieure à la complexité des algorithmes proposés dans *M. Nyberg & al. (2003)* [108] et *E. Frisk & al. (2003)* [109]. L'algorithme proposé dans [101] est basé sur une approche descendante, c'est-à-dire qu'il commence avec le modèle complet du système et il réduit la taille du modèle étape par étape jusqu'à obtenir un modèle structurellement surdéterminé minimal (MSO). Les MSO résultants de cet algorithme conduisent aux relations de redondance analytique. *M. Krysanter & al. (2008)* [101] a mené des améliorations sur l'algorithme afin d'augmenter son efficacité et réduire sa complexité. Il est donc possible d'utiliser la structure réduite pour trouver tous les ensembles MSO conduisant aux RRAs dans la structure originale. L'inconvénient de cette méthode est qu'elle ne prend pas en compte la notion de déductibilité des variables : toutes les variables du système sont considérées comme déductibles et, de ce fait, certaines RRAs peuvent ne pas être réalisables.

Une méthode structurelle pour la conception des sous-systèmes testables est formalisée dans [102]. Cette méthode est basée sur un opérateur jointure venant de l'algèbre relationnel. Elle est basée également sur une abstraction structurelle des contraintes. En conséquence de quoi elle peut être appliquée à une très grande classe de systèmes : des systèmes continus échantillonnés, linéaires ou non linéaires, statiques ou dynamiques, à base de règle ou non. Elle permet aussi de trouver tous les tests de détection en prenant en compte la notion de déductibilité des variables. Cette méthode permet aussi de prendre en compte les ensembles d'exclusions permettant d'éviter les sous-systèmes testables irréalistes.

Dans la communauté de l'Intelligence Artificielle DX, le diagnostic à base de consistance est le plus répandu pour diagnostiquer les défauts. Plusieurs approches de diagnostic à base de consistance exigent de calculer les ensembles de conflits possibles et de générer les diagnostics candidats. Un conflit est un ensemble de composants dont l'hypothèse de comportement normal est inconsistante avec les observations courantes. *B. Pulido & al. (2002)* [103] et *(2004)* [104] ont proposé une méthode pour générer les conflits possibles nécessaires pour la détection et la localisation des défauts. Cette méthode est composée de deux étapes. La première étape consiste à chercher les systèmes sur-déterminés. La deuxième étape consiste à vérifier si ces systèmes peuvent être résolus en utilisant la propagation locale. La définition de hyper-graphe est nécessaire à la conception de cette méthode. *B. Pulido & al. (2002)* [103] et *(2004)* [104] ont proposé des algorithmes pour construire l'ensemble des chaînes d'évaluation minimales MECs.

Ces modèles d'évaluation minimale (MEMs) pourraient conduire à des conflits. L'avantage

de cette méthode de conception de conflits est que l'ensemble de MEMs peuvent être calculés hors ligne sans aucune évaluation du modèle. Les conflits peuvent apparaître seulement quand les observations sont introduites et l'évaluation du modèle est calculée. Ces conflits résultant seront utilisés pour la détection et la localisation de défauts. La méthode proposée dans [104] permet de trouver les modèles d'évaluation minimaux conduisant aux conflits pour la détection et la localisation des défauts. Elle présente la particularité d'être difficile d'accès et complexe à mettre en œuvre.

On a remarqué que la méthode basée sur la recherche de couplages dans un graphe biparti permet de trouver les RRAs en prenant en compte la notion de déductibilité (calculabilité) mais l'inconvénient de cette méthode est qu'il y a beaucoup de redondances dans les calculs. La méthode basée sur le retrait consécutif de capteurs résout le problème de redondances mais la complexité est exponentielle par rapport au nombre de variables du système. La méthode basée sur la décomposition Dulmage-Mendelshon résout le problème de redondance et la complexité, mais l'inconvénient de cette méthode est qu'elle ne prend pas en compte la notion de déductibilité (calculabilité). On a présenté aussi une méthode de conception de conflits issue de la communauté de l'intelligence artificielle. Cette méthode permet de trouver les modèles d'évaluation minimale conduisant aux conflits. Elle présente la particularité d'être difficile d'accès et complexe à mettre en œuvre. *A. A. Yassine & al. (2007)* [102] a présenté une méthode plus générale et d'un ordre de complexité moindre que ces méthodes existantes, qui peut fournir toutes les relations de redondance analytique d'un système à diagnostiquer pour n'importe quelle classe de systèmes et qui permet de tenir compte de la déductibilité (calculabilité) des variables par rapport aux contraintes. Cette méthode améliore les résultats présentés dans *S. Ploix & al. (2005)* [110]. L'algorithme proposé est basé sur un opérateur "jointure" venant de l'algèbre relationnel. Il se fonde également sur une abstraction structurelle des contraintes et trace de toutes les contraintes impliquées dans les sous systèmes testables obtenus. Ce point est crucial en analyse diagnostique où il s'agit de comprendre les causes possibles d'un test révélant une anomalie.

1.4.2 Structure d'un système comme un graphe bi-partite

Un graphe bi-partite est un graphe dont l'ensemble de nœuds est divisé en deux sous ensembles tel que chaque arc de ce graphe relie un nœud du premier ensemble à un nœud de l'autre ensemble. Un graphe biparti peut être un digraphe et un digraphe est généralement un graphe biparti en diagnostic. Il est l'outil le mieux adapté à l'analyse structurelle, par la vérification de l'état du couplage entre un ensemble de contraintes et un ensemble de variables inconnues. Lorsqu'il est possible de calculer toutes les variables inconnues en utilisant juste une partie des contraintes, le reste constitue des relations de redondance analytique. Le couplage des variables est présenté clairement par la matrice d'incidence (image de graphe-bipartite).

La notion de couplage est centrale dans les approches liées au diagnostic exploitant les graphes bipartis. Les couplages sont des liens causaux qui associent, dans un système, des variables inconnues à des contraintes à partir desquelles elles peuvent être calculées. Les variables qui ne peuvent pas être couplées ne peuvent pas être calculées. Les variables qui peuvent être couplées de plusieurs manières peuvent être calculées par différents moyens. La théorie des graphes bi-partite montre que n'importe quel graphe bi-partite de dimension finie peut être décomposé en trois sous-graphes avec des propriétés spécifiques, respectivement liés soit à un système sur-déterminé, juste-déterminé ou sous-déterminé. Cette décomposition est canonique et les trois sous-ensembles jouent un rôle important dans l'analyse des propriétés structurelles d'un système (observabilité, commandabilité,...).

1.5 Diagnostic robuste des processus chimiques

Définition 1.4 (*Système incertain*)

Un système soumis à des incertitudes sur la structure du modèle, la dimension (entrée inconnue), les paramètres ou encore les mesures (par exemples, incertitudes de la matrice de variance dans le filtre du kalman), est dit incertain.

Définition 1.5 (*Robustesse*)

La robustesse constitue un degré correspondant à des performances attendues définies par un cahier des charges (taux de fausses alarmes et taux de non-détection). La robustesse serait donc le rapport entre une sensibilité maximale vis-à-vis du défaut recherché et une sensibilité minimale vis-à-vis des autres défaillances (variations de paramètres, modification de structure, bruit...).

La robustesse est bien évidemment le point clé des stratégies de diagnostic et a fortiori lors de l'utilisation de la redondance analytique. En effet, comme nous l'avons vu, les incertitudes sur le modèle du système constituent le handicap majeur des méthodes à base de redondance analytique. C'est pourquoi plusieurs travaux ont été réalisés dans la littérature pour développer des méthodes de diagnostic robuste, se basant sur les différentes informations disponibles pour décrire le comportement des systèmes. Ce paragraphe est dédié donc, aux méthodologies basées sur l'utilisation de modèles permettant d'aborder le problème de détection et localisation robustes de défauts.

1.5.1 Méthodes robustes à base de modèles

Un problème important qui se pose lors de la synthèse d'un système de surveillance à base de modèles, est de garantir la robustesse vis-à-vis des perturbations physiques (phénomènes indésirables mais jugés normaux) et des imperfections de modèle. D'autre part, les performances d'un tel système se mesurent tout naturellement par sa sensibilité vis-à-vis des

phénomènes dont l'effet peut être interprété comme anormal, tout en minimisant le taux de non détection ainsi que le retard à la détection. L'approche à base de modèles paramétriques est fondée sur une estimation des paramètres d'un modèle de comportement du système appartenant à une classe de modèles donnée. La variation, à l'extérieur d'une zone de confiance de ces paramètres est interprétée comme la manifestation d'une défaillance qui peut être détectée, avec un indice de confiance donné, par un test de décision. Dans l'approche à base de vecteur de parité, le résidu est généré en projetant les données mesurées dans un espace appartenant au sous espace vectoriel supplémentaire au sous espace vectoriel engendré par les colonnes de la matrice d'observabilité d'ordre réduit. Dans les approches à base d'observateurs, tout comme dans une approche par synthèse directe de filtre DLRD, le résidu est défini comme étant la différence entre une combinaison linéaire des sorties et des entrées et leurs estimations respectives. Plus récemment, les observateurs ont été proposés pour satisfaire aux contraintes de sensibilité/robustesse, où le problème d'optimisation est formulé et résolu par des techniques LMI.

Dans la littérature, la stratégie du diagnostic des systèmes incertains pour résoudre le problème de détection et d'isolation de défauts s'appuie sur le couplage et le découplage. Alors, un découplage parfait des résidus n'est pas toujours possible du fait des perturbations ou des incertitudes sur les paramètres du modèle du processus. Aussi, on devra parfois se contenter d'un découplage approché, celui-ci devant demeurer optimal en présence de perturbations. Pour les approches à base d'observateurs, le découplage est réalisé par placement de pôles ou par l'intermédiaire des observateurs à entrées inconnues.

De façon générale, des approches sont introduites : *R.J. Patton & al. (1991)* [111] ont choisi d'avoir un découplage approché, tandis que *P.M. Frank & al. (1997)* dans [112] ont choisi de minimiser au sens des moindres carrés sous contraintes un indice de performance sur les résidus. Ces deux méthodes permettent une grande flexibilité lors de l'implémentation de la stratégie de surveillance car elles permettent de combiner à la fois le découplage parfait et un découplage approché et optimal. La qualité du découplage diminuera en fonction du nombre croissant des perturbations.

Pour ce qui concerne les améliorations des méthodes par espace de parité, on peut citer les travaux de *Chow & al. (1984)* [113] qui améliorent la robustesse du système de diagnostic en prenant en compte directement les incertitudes sur les équations de redondance dans l'algorithme d'optimisation. Mais la première idée pour augmenter le degré de robustesse du résidu généré est d'inclure dans la modélisation du processus les perturbations (bruit, incertitudes sur les paramètres...). Dès lors, on peut séparer les actions des incertitudes de celles des défauts. Il est ainsi possible de concevoir le générateur de résidus de façon à ce qu'il soit sensible aux défauts tout en demeurant insensible aux incertitudes. Il est évident cependant qu'il ne s'agit là que d'un compromis entre les deux sensibilités et en aucune façon on ne peut

parler de robustesse totale. On ne fait que minimiser le taux de fausse alarme par rapport aux incertitudes.

Pour les méthodes à base d'estimation d'état, la robustesse est donc surtout requise au niveau de l'étape de génération des résidus (structuration dans l'optique de la localisation), donc au choix du gain de l'observateur (ou du filtre). Celle-ci doit être en effet choisie de manière à découper les effets des défauts (pour la localisation) mais aussi à rendre les résidus indépendants des entrées inconnues. De ces considérations découlent les travaux de *R.J. Patton & al. (1991)* [111], sur le problème de placement des pôles définissant la rapidité du reconstituteur utilisé. L'utilisation d'observateurs à entrées inconnues permet d'assurer un découplage des résidus ce qui permet l'isolation des défauts et d'atteindre une meilleure robustesse vis-à-vis de certaines permutations.

D. Henry & al. (2001) [114] s'est également investi dans ce domaine en développant un cadre méthodologique général pour la conception de systèmes de diagnostic robustes à base de modèles. Leurs travaux ont permis d'établir des résultats importants en analyse et en synthèse, pour différents types d'incertitudes qui peuvent être prises en compte par le formalisme LFT. En synthèse, la méthodologie développée permet l'intégration simultanée des contraintes de robustesse (portant sur une classe générale d'incertitudes) et des spécifications de performances multi-objectifs. Ces méthodes sont appliquées sur des systèmes électriques ou électroniques et pas sur des procédés énergétiques et chimiques.

L'étape d'évaluation des résidus consiste en l'analyse des résidus. Elle dépend donc fortement de la nature des résidus. En effet, on doit savoir si on recherche dans les résidus des événements temporels ou fréquentiels. Ainsi, si on doit détecter la présence de bruits aléatoires, on fera appel à des tests statistiques. En ce qui concerne par contre la sensibilité des résidus à des défauts, on devra déterminer des seuils de détection et utiliser des tests adéquats en fonction du type de défaut. Sur ce sujet, on peut citer les études de *M. Basseville. (1998)* [115].

L'idée générale est d'évaluer correctement les propriétés du résidu en fonction d'hypothèses comme un seuil maximal (en valeur absolue) ou des propriétés statistiques (blancheur). Les hypothèses posées des défauts à détecter d'une part et des propriétés attendues du résidu en fonction de la façon dont il a été généré. Différents seuils peuvent être définis et différents tests statistiques (test de page, test bayésien, Cusum, ... etc) peuvent être mis en œuvre. Ainsi, le seuil de détection utilisé doit être le plus adapté au résidu généré en fonction du défaut à détecter. Si le seuil est trop grand, la sensibilité par rapport au défaut sera trop faible tandis que dans le cas contraire le taux de fausse alarme sera plus important. Il est donc évident que la problématique réside en l'établissement d'un seuil de détection optimal.

1.5.2 Bond Graph pour le diagnostic robuste des processus chimiques

Concernant, l'utilisation des bond graphs pour les problèmes de diagnostic, peu d'équipes utilisent cette démarche. Aujourd'hui seules quelques équipes dans le monde travaillent dans cet esprit depuis quelques années ; citons à titre d'exemple Prof. Gawthrop à l'Université de Glasgow, Prof. Linkens à l'Université de Sheeld, Prof. Scavarda à l'INSA de Lyon, Prof Delgado à l'Université Simon Bolivar de Caracas (Vénézuéla). Dans ces travaux, le modèle bond graph est souvent utilisé pour déterminer d'autres formes de représentation des systèmes permettant ainsi l'utilisation des méthodes classiques (schéma bloc, étude de l'observabilité) pour décider ensuite le nombre, la position des capteurs et des actionneurs défaillants. On peut aussi citer aussi les travaux récents sur le diagnostic des systèmes à l'aide des bond graphs qualitatifs (J. Feenstra de l'Université de Twente Hollande, J. Mosterman de l'Institut de Robotique et de Mécatronique, RFA, ou C.Ghiaus de l'Université du Kansas USA, et Kohda de l'Université de Kyoto *T. Kohda & al. (1993)* [113]). Les travaux sur le diagnostic des processus en génie des procédés ne sont pas traités d'une façon spécifique, mais sont utilisés plus comme des applications de méthodologies : détection et l'isolation de fuites de gaz dans un récipient d'injection de charbon dans un fourneau utilisant la méthode GLR (Generalized Likelihood Ratio), détection et isolation des dégradations des capteurs dans une centrale nucléaire utilisant les redondances matérielles et analytiques [116].

Par sa structure graphique, l'outil Bond Graph permet une analyse causale et structurelle directement sur le modèle. Ces propriétés fonctionnelles et causales permettent alors de générer les RRAs de façon modulaire sur la base des équations de conservation énergétique issues des jonctions 0 et 1. Enfin, les défauts processus (de type fuite, blocage,...) peuvent être systématiquement affectés aux RRAs qui leur sont sensibles, car ces indicateurs sont déduits des équations énergétiques. Cette propriété permet alors d'automatiser la construction des tableaux de signature des pannes et des matrices d'incidence.

Parmi les récents travaux qui utilisent l'outil bond graph pour la modélisation des incertitudes paramétriques, *C. Sié Kam & al. (2005)* [117] et *W. Borutzky & al.(2004)* [118] proposent deux méthodes de modélisation des incertitudes sur les éléments bond graph. La première consiste à représenter l'incertitude paramétrique comme un élément bond graph, et la deuxième introduit la forme LFT. Les incertitudes peuvent être alors modélisées sur des éléments de type résistif R , capacitif C , inductif et inertiel I . Nous proposons dans ce travail d'utiliser quelques résultats déjà développés dans le domaine de la modélisation par Bond Graph des incertitudes [117] pour le diagnostic des systèmes chimiques incertains non linéaires.

Dans cette partie, la contribution consiste à exploiter les propriétés causales, structurelles et fonctionnelles d'un bond graph couplé afin de développer une procédure de génération automatique des indicateurs de fautes robustes pour des processus industriels de nature com-

plexe ou non linéaire. Concrètement, il s'agit de mettre en place une méthode de surveillance à base d'un modèle Bond Graph incertain sous forme LFT pour la détection et la localisation de défauts.

En comparant avec d'autres modèles graphiques (SDG, digraphe, graphe biparti, ...) où les sommets sont les variables et les arcs représentent l'influence mutuelle entre ces variables, le BG est également un graphe, mais les sommets sont des éléments de Bond Graph (les composants et les jonctions physiques), et les arcs représentent la puissance échangée comme produit de deux variables conjuguées effort-flux. Un digraphe est un graphe $G(S, A)$ issu des équations d'états $\frac{dx}{dt} = Ax + Bu$, où S est l'ensemble des sommets représentant les variables d'entrée u , d'état x et de mesure y . Cette représentation étant pauvre (seul l'état, la mesure et les actionneurs sont représentés), le cahier des charges du système de surveillance est limité aux défauts capteurs et actionneurs. Les diverses approches quantitatives et qualitatives du FDI à base du modèle bond graph ont été développées pour détecter et isoler des défauts dans des domaines à mono-énergie, mais aucun de ces travaux n'aborde le diagnostic des systèmes non linéaires couplés (des phénomènes de transformation et des phénomènes énergiques).

SDG est une approche qualitative (même si le modèle dynamique peut être utilisé pour la génération des SDG) bien adaptée pour le processus lorsque les modèles mathématiques précis sont difficiles à obtenir. En comparant avec les méthodes SDG, le BG est un modèle quantitatif. En outre, en raison de ses propriétés structurelles, comportementales et causales, le BG est largement utilisé non seulement pour la modélisation dynamique, mais également pour l'analyse de commande (observabilité, contrôlabilité, la génération de fonction de transfert, équations d'état) pour des modèles déterministes *B. Ould Bouamama & al. (2006) [20]* et incertains *M.A. Djeziri & al. (2007) [119]*.

Par conséquent, par rapport aux autres méthodes de diagnostic de défaut, les avantages de la méthode Bond Graph sont comme suit : (i) Utilisation d'une seule représentation pour la modélisation, la génération des RRAs formelles et l'analyse de diagnosabilité, (ii) Les RRAs formelles et le modèle dynamique (sous forme d'une équation d'état) peut être généré automatiquement en utilisant le logiciel Symbols *B. Ould Bouamama & al. [20]*, (iii) le modèle est basé sur l'approche énergétique, ce qui signifie que l'architecture (topologique, physique et instrumentale) sont affichés sur le graphe, (iv) la diagnosabilité structurelle peut être déterminée à partir du modèle graphique (sans aucun calcul numérique), (v) Grâce à l'aspect modulaire et fonctionnelle du bond graph, les RRAs sont systématiquement associés aux défauts (capteurs, actionneurs et physiques) qui peuvent affecter le système. Toutefois, certains inconvénients peuvent être cités : (i) les propriétés sont structurelles, elles doivent alors être vérifiées numériquement, (ii) les modèles sont à paramètres localisées.

1.6 Conclusion

Ce chapitre a fourni une présentation succincte des différentes techniques de diagnostic classiquement utilisées. Ces méthodes de détection et d'isolation des défaillances des processus chimiques et surtout des réacteurs chimiques ont été largement développées dans les 20 dernières années. Dans l'industrie chimique, sont privilégiées les méthodes hors ligne basées sur les méthodes de type HAZOP analysis (Analyse des risques) ou les AMDECs (pour l'analyse des causes et les origines des défaillances ainsi que leur criticité).

En ligne, un très grand nombre de développements a concerné les approches basées sur des modèles quantitatifs du processus utilisant la technique de calcul des résidus. Cependant différents facteurs tels que la complexité du système, la non linéarité des processus ont souvent rendu très difficile le développement d'un modèle mathématique précis pour assurer un diagnostic fiable et robuste des réacteurs chimiques. En particulier, un modèle trop simple ne permet pas de générer des résidus représentatifs uniquement de défaillances, mais ils intègrent le plus souvent les erreurs de modélisation ou de dérives normales des paramètres.

En raison du caractère multiphysique et un couplage fort de plusieurs énergies des processus chimiques, il a été montré que l'outil bond graph (par ses propriétés causales, structurelles et fonctionnelles) peut être une alternative pour la génération d'indicateurs de fautes robustes et sensibles à plusieurs types de défauts (actionneurs, mesure et processus). La modélisation des processus chimiques (réacteurs et réactions chimiques, échangeur de chaleur... etc.) sera développée dans le chapitre suivant.

Chapitre 2

Modèles Bond Graphs couplés incertains des processus chimiques

2.1 Introduction

Le but de ce chapitre est de développer une méthodologie pour la génération de modèles dynamiques formels des composants et des phénomènes chimiques. Ces modèles seront utilisés pour fournir à l'utilisateur une bibliothèque de modèles génériques pour la conception d'algorithmes de surveillance en ligne de procédés en génie chimique. La démarche consiste, en premier lieu, à établir des modèles pour les réactions principales (réversible ou irréversible) et les réacteurs chimiques et ensuite de générer les modèles bond graphs déterministes et incertains correspondants. Ces modèles bond graphs seront utilisés pour la génération de RRAs pour la détection et la localisation de défauts au niveau du milieu réactionnel lors de l'apparition des réactions dérivées (secondaires, non prévues...). Un placement de capteurs peut alors être proposé pour améliorer la surveillabilité du processus chimique. Cette procédure peut être automatisée sur la boîte à outil FDIpad *R. El Harabi & al. (2010)* [120] [121] développée initialement pour les systèmes déterministes.

En effet, les modèles chimiques concernent les réacteurs chimiques, c'est-à-dire, les équipements au cœur desquels s'effectuent les transformations chimiques. Il est souvent utile de modéliser non seulement les conditions hydrodynamiques dans lesquelles se réalisent la transformation mais également cette transformation elle-même. En d'autres cas, ces modèles chimiques permettent de simplifier l'approche globale des phénomènes, en dégageant les grands traits de la transformation et l'importance relative présumée des différents phénomènes impliqués.

Les processus chimiques et thermodynamiques sont en réalité non stationnaires : les coefficients d'échange de chaleur, les constantes de vitesse des réactions et la conductivité thermique des conduites varient en fonction du régime technologique, ce qui nécessite effectivement

d'adapter le modèle selon la situation traitée, *O. Levenspiel (1999)* [122].

La modélisation par bond graphs des systèmes thermiques, thermodynamiques ou tout simplement en génie énergétique et des procédés reste encore un domaine ouvert en raison de la complexité de ces phénomènes. Ce sont pourtant ces types de processus, présents dans les industries à risque qui nécessitent pour leur connaissance et leur contrôle des modèles de plus en plus précis et exploitables. De ce fait, l'utilisation des modèles bond graph comme un outil intégré pour la modélisation et la conception des systèmes de surveillance a été développée et appliquée aux systèmes thermo fluides *A.K. Samantaray & al (2006)* [18]. Cette méthodologie, *H. M. Paynter (1961)* [12] et *J.U. Thoma (1975)* [123] en tant qu'outil flexible et multidisciplinaire est alors utilisée, dans une démarche intégrée, pour la modélisation, l'analyse, la synthèse et la surveillance de tels procédés multi-énergies. Les propriétés causales et structurelles des bond graphs permettent d'un côté de vérifier la validité et la consistance des modèles dynamiques générés et de l'autre côté d'analyser la commandabilité, l'observabilité et la surveillabilité du système sans faire de calcul numérique. En outre, à partir du modèle bond graph global, on peut facilement délimiter des zones autour des structures des jonctions pour créer des sous-modèles bond graphs représentant les composants élémentaires du système.

Cette théorie se base sur l'utilisation de la paire de variable de puissance effort-flux pour décrire n'importe quel système. Ces variables correspondent aux grandeurs intensives et à la dérivée des variables extensives respectivement. Le choix de ces variables n'est pas trivial. D'une manière plus globale, en génie des procédés et énergétique, l'utilisation de vrais bond graphs (le produit effort-flux est une puissance) introduit des variables d'effort et de flux thermique et chimique (température, potentiel chimique, et flux d'entropie, flux molaire) qui sont de nature complexe et inadaptées aux problèmes de simulation, non accessibles aux mesures, car ils n'obéissent pas à des lois de conservation simples (l'entropie par exemple n'est pas conservée). On introduit alors pour leur modélisation un pseudo bond graph pour lequel le produit des variables d'effort et de flux n'a plus la dimension d'une puissance. Toutefois, il faut noter que les propriétés classiques (causales, structurelles, mise en équations,...) déduites d'un vrai bond graph restent valables pour un pseudo bond graph.

En s'inspirant des travaux de *P.C Breedveld & al. (2008)* [124], *M. Delgado & al. (1999)* [125] et *J. Thoma & al (2000)* [126], les variables de puissance manipulées sont les couples (pression P , débit volumique \dot{V}) et (température T , flux d'entropie \dot{S}) en vrai bond graph, ou (pression P , débit massique \dot{m}) et (température T , flux d'enthalpie \dot{H} ou de chaleur \dot{Q}) en pseudo bond graph. La modélisation des réacteurs chimiques est peu développée dans la littérature en raison de la complexité de ce type de système puisque un nouveau couple des variables de puissance ((potentiel chimique μ , flux molaire \dot{n}) en vrai bond graph ou (concentration C , flux molaire \dot{n}) en pseudo bond graph) représentant la transformation de la matière, s'ajoute aux variables thermofluidiques.

Dans ce chapitre, nous allons présenter et discuter les modèles bond graph existant dans la littérature, et se positionner par rapport à ces travaux afin de proposer une démarche pour simplifier la modélisation et la conception des modèles bond graph génériques déterministes et incertains pour le diagnostic robuste des réactions chimiques et des réactions secondaires en premier lieu et qui s'étend par la suite vers les équipements d'une installation industrielle. La théorie classique du Bond graph n'est pas décrite ici mais peut être consultée dans *D. Karnopp (2000) [13]* et *J.U. Thoma (1975) [123]*. On rappelle dans la section suivante les bases des Bond Graph à énergie couplée suivie par les modèles des processus chimiques.

2.2 Modèles bond graphs multiénergies

L'outil bond graph est un langage de modélisation basé sur une description énergétique des phénomènes physiques. Les relations de causes à effets sont décrites par des boucles et des chemins causaux, représentant les intra-échanges et les extra-échanges de puissances du système modélisé. Les contraintes sur un modèle bond graph sont attribuées aux comportements des éléments R , C , I , RS , TF et GY , et aux jonctions 0, 1 (associées aux lois de conservation d'énergie). Les éléments R , C , I , RS , TF et GY représentent, respectivement, les phénomènes de : dissipation d'énergie, de stockage sous forme potentielle (C) et cinétique (I) d'énergie, de génération de l'entropie (RS), et de transformation (TF et GY) d'énergie. Chaque élément est régi par une contrainte dite de comportement, contenant deux variables inconnues qui sont l'effort et le flux sur l'élément bond graph. Les jonctions 0, 1 représentent la structure du système, elles décrivent le lien entre les différents éléments en définissant les relations de partage et de conservation d'efforts et de flux. Le détecteur d'effort est lié à une jonction 0 où l'effort est conservé, tandis que le détecteur de flux est lié à une jonction 1 où le flux est conservé. Les détecteurs (capteurs) n'échangent pas de puissance avec le système, mais des informations. C'est pourquoi ils sont représentés par une flèche appelée lien d'information.

2.2.1 Représentation des bond graphs à énergies couplées

Les bond graphs mono énergie sont utilisés pour la modélisation des processus mettant en œuvre une seule énergie à la fois (mécanique, électrique, thermique,...).

Les processus technologiques en génie des procédés sont caractérisés par l'interaction des phénomènes thermiques, hydrauliques et chimiques. Ces trois formes de puissances sont couplées et sont représentées par bond graph à énergies couplées. Ainsi, les systèmes chimiques introduisent une complexité supplémentaire dans leur modélisation, puisque le flux d'énergie chimique (débit molaire) et thermique (débit d'enthalpie) sont liés respectivement à la même masse du fluide transporté d'une position à une autre sans/avec effet de dissipation. Suite au phénomène de la transformation de matière, *B. Ould Bouamama (2001) [127]* propose alors

de présenter les variables de puissance sous la forme vectorielle suivante:

$$E = [e_h \ e_t \ e_c]^t, \quad F = [f_h \ f_t \ f_c]^t \quad (2.1)$$

Ces deux vecteurs sont de dimension deux dans le cas des processus thermofluides et de dimension trois si sont ajoutés les phénomènes chimiques.

e_h , e_t et e_c représentent respectivement l'effort thermique, hydraulique et chimique, f_h , f_t , et f_c désignent respectivement les flux correspondants.

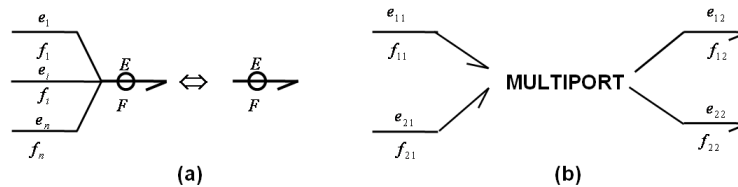


FIG. 2.1 – Représentation des bond graphs à énergies couplées

Pour bien distinguer les différentes énergies, on modélise les bond graphs multi énergies par un multiport (Figure 2.1.a) ou par deux liens distincts (représentant les deux puissances découplées) couplés par un lien d'information (Figure 2.1.b). Cette dernière représentation est plus adaptée au diagnostic.

La définition des variables de puissance pour les systèmes thermo-chimiques introduit une autre complexité. En effet, dans les systèmes mécaniques et électriques, le nombre de variables de liaison est égal au nombre de degrés de liberté. Ainsi, dans un système électrique (ou mécanique) le nombre de degrés de liberté (égal à deux) est égal au nombre de variables de puissance puisque la paire de variables tension-courant (ou force-vitesse) décrit complètement le système. Par contre, les systèmes thermo-chimiques (une réaction en déroulement par exemple) sont caractérisés par un ensemble de variables, qui est pour les efforts : la pression P , la température T et le potentiel chimique μ , et pour le flux, le débit volumique \dot{V} (ou massique \dot{m} pour le fluide compressible), le flux d'entropie \dot{S} et le débit molaire \dot{m} . D'autres variables peuvent aussi intervenir telles que le flux d'énergie interne, \dot{U} , le flux d'enthalpie \dot{H} , la concentration C , l'affinité chimique A et la vitesse de la réaction J . On remarque que le nombre de variables est supérieur au nombre de degrés de liberté, c'est pourquoi le choix de la variable de liaison n'est pas unique et dépend de la nature du système à modéliser.

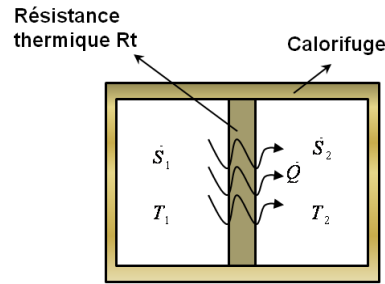


FIG. 2.2 – Transfert thermique dans une réaction chimique.

En vrai bond graph, la variable de flux thermique est le flux d'entropie \dot{S} . Mais, l'entropie n'est pas conservée dans un processus de convection (comme indiqué plus haut). Dans le cas de la modélisation de la matière au repos (problème de conduction) qu'on rencontre en général dans les échangeurs de chaleur, dans les fours, dans les pertes thermiques à travers les parois etc., on peut utiliser aussi bien la paire (T, \dot{S}) pour constituer un vrai bond graph que la paire température-flux thermique (T, \dot{Q}) pour un pseudo bond graph. L'utilisation de cette dernière est toutefois plus commode. En effet, le flux de chaleur échangé entre deux corps (portés à des températures) est décrit par une simple équation constitutive en pseudo bond graph (analogue à la loi d'ohm en électricité, où R est la résistance thermique) :

$$\dot{Q} = \frac{1}{R} (T_1 - T_2) \quad (2.2)$$

ce qui se représente facilement par un modèle bond graph. Par contre, l'utilisation du flux d'entropie conduit à écrire les lois sous forme non linéaire couplée (les deux variables \dot{S}_2 et \dot{S}_1 s'expriment en fonction des deux efforts T_1 et T_2 ce qui nécessite l'utilisation d'un élément R à deux ports. L'expression des flux d'entropie déduite de l'équation de Carnot est :

$$\dot{Q} = \dot{S}_2 - \dot{S}_1 = \frac{1}{R} \frac{(T_1 - T_2)^2}{T_1 T_2} \quad (2.3)$$

Le calcul de l'effort thermique $(T_1 - T_2)$ à partir de l'équation 2.3 devient complexe.

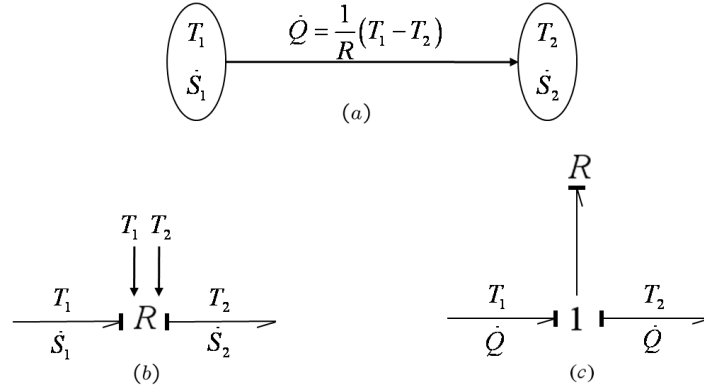


FIG. 2.3 – *Choix des variables de liaison pour le phénomène de conduction. (a) schéma de principe (b) utilisation d'une résistance modulée pour la paire (T, \dot{S}) (c) utilisation d'une simple résistance pour la paire (T, \dot{Q})*

Dans le cas des processus thermofluides, nous modélisons deux énergies. e_t et e_h représentent alors respectivement la pression et l'enthalpie spécifique ou la température. f_t et f_h représentent respectivement le flux thermique et hydraulique.

Les flux d'énergie thermique \dot{E} et hydraulique ne sont pas indépendants. En réalité le flux thermique dépend de l'énergie due aux forces de pression ($\frac{P}{\rho}$), de l'énergie interne spécifique u , et de l'énergie cinétique convectée ($\frac{\rho v^2}{2}$):

$$\dot{E} = \dot{m} \left(u + \frac{P}{\rho} + \frac{\rho v^2}{2} \right) \quad (2.4)$$

v étant la vitesse du fluide, ρ sa densité et \dot{m} le débit massique.

En pratique, le terme $\frac{\rho v^2}{2}$ est négligeable pour des vitesses relativement faibles. L'enthalpie spécifique h est

$$h = u + \frac{P}{\rho} = c_p T \quad (2.5)$$

L'énergie convectée notée flux d'enthalpie \dot{H} est fonction de la variable d'effort thermique (h ou T), et de la variable de flux hydraulique \dot{m} . L'équation de couplage est donc :

$$\dot{H} = \dot{m} h = \dot{m} c_p T \quad (2.6)$$

(h restant constante pendant le transport du fluide).

La figure 2.4 montre le couplage entre les deux domaines (hydraulique et thermique) modélisé par une résistance fictive R_c .

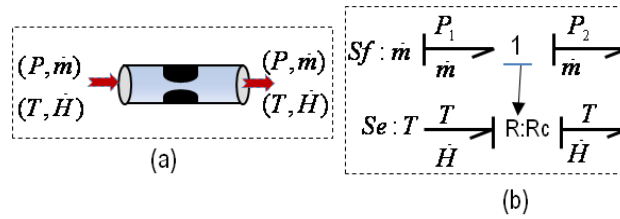


FIG. 2.4 – Couplage hydrauthermique

En pseudo bond graph, la variable de flux thermique est le flux d'enthalpie \dot{H} dans le cas de la convection (thermodynamique avec matière en mouvement) et du flux thermique \dot{Q} dans le cas de la conduction.

2.2.2 Structure d'un modèle bond graph couplé

En général, les éléments dans les systèmes multiénergies se présentent sous forme de multiports. Trois des quatre modules défini par Rosenberg et Karnopp (1983) (sources, module dissipatif et module de stockage) sont reliés par des vecteurs à la structure de jonction vectorielle S_{ij} (figure 2.5). Par contre, le quatrième module est relié scalairement à la structure de jonction vectorielle puisque les capteurs sont définis dans un seul domaine d'énergie à la fois. Cette représentation sera appelée représentation vectorielle multiénergie.

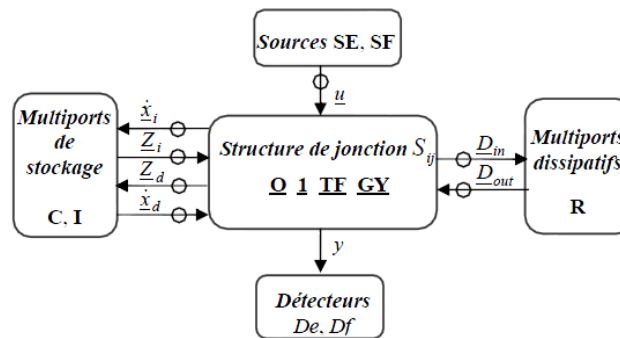


FIG. 2.5 – Représentation vectorielle d'un BG multiénergie

Les anneaux sur les liens représentent le couplage des énergies. Généralement les modèles BGs monoénergies sont composés des éléments simple R , C , I et des éléments multiports TF et GY . Pour les Bond Graphs multiénergies, des multiports R , C et I apparaissent en plus, ils sont liés à la structure des jonctions de chacune des énergies par un lien à la fois. Dans ces conditions, on définit :

- N le nombre d'énergie du modèle multiénergie.

- \underline{O} , $\underline{1}$, \underline{TF} et \underline{GY} les jonctions vectorielles (mettant en oeuvre plusieurs énergies) liant la structure de jonction aux différents multiports R , C , I et aux sources multiénergies SE et SF . Ces jonctions sont conservatives de puissance comme les éléments de jonctions simples.

- $\underline{x} = (x^{1t} x^{2t} \dots x^{Nt})^t$ (t étant la fonction transposée) est le vecteur d'état multiénergie couplé en vrai ou en pseudo bond graph (les variables d'état ne sont pas forcément indépendantes) formé par les concaténations des N vecteurs d'état x^j scindé en x_i et x_d respectivement associés aux multiports en causalité intégrale et dérivée.

- x^j est composé des moments généralisés p^j sur les multiports I et déplacements généralisés q^j sur les multiports C .

- \dot{x} est la dérivée par rapport au temps du vecteur d'état (variables e^j sur les multiports I et f^j sur les C).

- \underline{Z} représente le complémentaire de \underline{x} (variables f^j sur les I et e^j sur les C) scindé en Z_i et Z_d .

- $\underline{u} = (u^{1t} u^{2t} \dots u^{Nt})^t$ le vecteur d'entrée multiénergie (sources), SE et SF les sources d'effort et de flux multiénergies.

- y vecteur de sortie (capteurs).

- On a $\underline{D}_{in} = (D_{in}^{1t} D_{in}^{2t} \dots D_{in}^{Nt})^t$ et $\underline{D}_{out} = (D_{out}^{1t} D_{out}^{2t} \dots D_{out}^{Nt})^t$ avec \underline{D}_{in}^{jt} et \underline{D}_{out}^{jt} les vecteurs regroupant les efforts e^j et les flux f^j pour les multiports dissipatifs R .

2.3 Classification de procédés thermochimiques

2.3.1 Critères de classifications

On peut définir un certain nombre de critères de classification des réactions et des réacteurs chimiques en génie de procédés :

2.3.1.1 Mode de fonctionnement du réacteur

Ce critère dépend de la construction interne du réacteur et de l'écoulement du mélange réactionnel. En effet, en se basant sur un critère de classification lié au mode d'écoulement du mélange réactionnel, on distingue les réacteurs fermés, les réacteurs semi-fermés et les réacteurs continus. En se basant sur le critère de classification lié à la construction interne du réacteur, par exemple, on distingue des réacteurs à lit fluidisé, réacteurs à lit fixe (beaucoup plus de détails sont donnés dans *A.R. Khaled & al. (2006)* [128]). En effet, ces critères de classification vont nous permettre de définir un ensemble de catégories de réacteurs pour utiliser cette bibliothèque de modèles pour le diagnostic des processus chimiques en les implémentant dans la boîte à outil FDIPad *B. Ould-Bouamama & al. (2006)* [3].

2.3.1.2 Mode d'activation de la réaction

Ce critère dépend du déroulement de la réaction. Ainsi, pour simuler la réaction et augmenter sa vitesse, on a deux types de facteurs : les catalyseurs et la thermicité de la réaction. En effet, pour augmenter la vitesse d'une réaction et améliorer ainsi la productivité d'un procédé, les catalyseurs chimiques sont souvent utilisés pour interagir avec les molécules des réactifs et accélérer leur transformation et obtenir ainsi plus rapidement des produits désirés. Par rapport à ce critère de classification, on a deux types de réacteurs : réacteurs catalytiques et non catalytiques.

- *Thermicité de la réaction* : la plupart des réactions chimiques rencontrées en pratique sont caractérisées par la consommation ou le dégagement de chaleur. Ces réactions sont signées respectivement par "réactions endothermiques" ou "réactions exothermiques" respectivement. Ce facteur lié directement à toute transformation chimique influe la cinétique de la réaction. On distingue alors des réacteurs adiabatiques et iso-thermiques.

2.3.2 Classification de procédés thermochimiques

Du point de vue fonctionnel, les réservoirs, les chaudières et les ballons correspondent à des composants de stockage. En bond graph, ces éléments sont associés à un multiport capacitif C . Un élément C peut aussi représenter un phénomène tel que la compressibilité.

Les composants résistifs (ou dissipatifs) et de transformation associés au procédé sont les pompes, les moteurs, les turbines, les caloporteurs, les échangeurs de chaleur, les membranes, les électrodes...etc., qui transforment une puissance d'un domaine physique à un autre.

Dans les procédés de transport, la force qui provoque le déplacement de la matière est due à une différence d'effort (gradient d'effort, différence de pression, de tension, de potentiel chimique, de température, de concentration ...etc.).

En se basant sur les fonctions réalisées par les composants des trois classes sus-mentionnées, une classification non-exhaustive des procédés thermochimiques est donnée en figure 2.6. Les sources d'énergie thermofluides, similaires à celles données sur les bond graphs sont ajoutées aux classes des procédés thermochimiques. Les sources peuvent être modulées par des signaux de commande externes. Ces sources thermochimiques et thermofluides sont des flux chimiques, hydrauliques et thermiques conjugués véhiculés par le fluide.

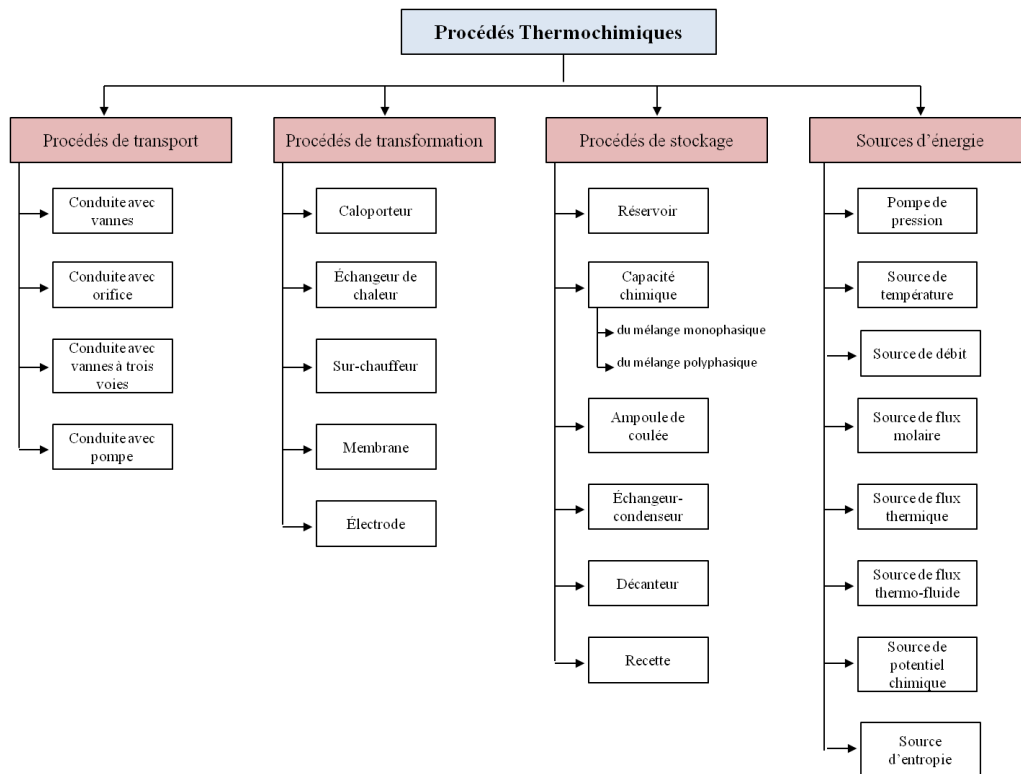


FIG. 2.6 – Différents composants des classes de procédés thermochimiques

2.4 Modèles Bond Graph déterministes des systèmes réactifs

2.4.1 Modélisation des réactions chimiques

Dans cette partie, on s'intéresse à la modélisation des phénomènes physico-chimiques qui caractérisent la réaction lors de son déroulement. On peut distinguer

- phénomène de la cinétique chimique
- phénomène de la thermodynamique chimique
- phénomène de transport de matière : diffusion/migration
- phénomène transfert de charge : électrochimique

La modélisation des systèmes réactifs thermodynamiques à masse constante par bond graph a été introduite dans les travaux de *F.E. Cellier (1991)* [129] et *A.P.G.F. Oster (1974)* [130] *L. John & al.* [131], traitant le cas d'une réaction chimique loin de l'équilibre. Dans la partie suivante, nous allons développer, la modélisation par bond graph des systèmes chimiques et thermodynamiques à masse variable.

2.4.1.1 Modélisation de la cinétique chimique

Les transports de matière d'un point à un autre, les transferts de matière d'une phase à une autre, les transformations d'un ensemble de réactifs en un ensemble de produits se réalise avec une certaine vitesse, vitesse est généralement d'autant plus élevée que le système est éloigné de son état d'équilibre mécanique, physique ou chimique.

Ces phénomènes relèvent de la cinétique sous deux aspects :

- La cinétique chimique, relative aux transformations chimiques ;
- La cinétique chimique relative aux transferts et aux transports.

On considère un système réactif contenant une réaction réversible supposée en équilibre local, où la température T et la pression P sont uniformes dans toute la substance. Cette réaction est définie comme suit :



ν_i sont les coefficients stoechiométriques, A_f et A_r sont les affinités chimiques directe (*forward*) et inverse (*reverse*).

Dissipation d'énergie (Multiport \mathbb{R}) Considérons l'aspect cinétique de la réaction, autrement dit, à la vitesse à laquelle les réactifs sont consommés.

La cinétique de la réaction directe et inverse est donnée sous la forme classique trouvée dans la littérature *G. Falk (1976)* [132] et *G. Job (1981)* [133]. Elle satisfait l'hypothèse de la relation constitutive de la loi d'action de masse. La vitesse de la réaction rapportée à l'unité de volume de phase réactionnelle (vitesse intensive) est alors indiquée par $r_r = r_r^f - r_r^r$, qui est la différence entre la vitesse de la réaction directe:

$$r_r^f = k_f(T_r) \prod C_i^{\nu_i^f} \quad (2.8)$$

et la vitesse de la réaction inverse:

$$r_r^r = k_r(T_r) \prod C_i^{\nu_i^r} \quad (2.9)$$

où T_r est la température de la réaction, $C_i = \frac{n_i}{V}$ sont les concentrations molaires de constituant i . Les constantes de vitesses $k_f(T_r)$ et $k_r(T_r)$ suivent l'équation d'Arrhénius:

$$k_j(T_r) = k_{0j} e^{\frac{-E_{aj}}{RT_r}} \quad (2.10)$$

R est la constante universelle du gaz ($[Jmol^{-1}K^{-1}]$), E_{aj} est l'énergie d'activation ($[Jmol^{-1}]$) de deux réactions et k_{0j} est le facteur de pré-exponentiel ($[s^{-1}]$).

Afin de dériver une représentation de la théorie cinétique des réactions en bond graph, Oster et co-auteurs ont considérés l'affinité directe A_f et l'affinité inverse A_r comme des forces d'entraînement (motrice) des réactions chimiques dans deux sens d'évolution [130].

D'abord, soit $A = \begin{pmatrix} A_f \\ A_r \end{pmatrix}$ le vecteur d'affinité chimique totale et $J = \begin{pmatrix} J_f \\ J_r \end{pmatrix}$ le vecteur de la vitesse extensive de la réaction rapportée à la totalité du volume de l'enceinte réactionnelle (vitesse globale) qui est donné par :

$$J = \begin{pmatrix} J_f = (r_r^f - r_r^r) V \\ J_r = (r_r^r - r_r^f) V \end{pmatrix} \quad (2.11)$$

En outre, les affinités des réactifs et des produits sont définies en tant que fonctions linéaires des potentiels chimiques et liées à la matrice stœchiométrique comme suit:

$$A = \begin{pmatrix} A_f \\ A_r \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \nu_1^f & \dots & \nu_k^f & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \dots & 0 & \nu_{k+1}^r & \dots & \nu_m^r \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mu_i \\ \vdots \\ \mu_k \\ \mu_{k+1} \\ \vdots \\ \mu_m \end{pmatrix} \quad (2.12)$$

On note par J_i la vitesse d'évolution de nombre de mole d'un constituant i . La vitesse globale de la réaction est liée aux coefficients stœchiométriques selon l'expression suivante :

$$J = \begin{pmatrix} J_1 \\ \vdots \\ J_k \\ J_{k+1} \\ \vdots \\ J_m \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \nu_1^f & 0 \\ \vdots & \vdots \\ \nu_k^f & 0 \\ 0 & \nu_{k+1}^r \\ \vdots & \vdots \\ 0 & \nu_m^r \end{pmatrix} \begin{pmatrix} J_f \\ J_r \end{pmatrix} \quad (2.13)$$

Il est facile de voir que les relations (2.12) et (2.13) définissent deux relations d'adjoint entre les paires de variables de puissance conjuguées et par conséquent peuvent être représentées par un élément TF de transformateur, les équations constitutives liant les efforts et les flux

de ces éléments sont [132] :

$$\left\{ \begin{array}{l} A_f = \sum \nu_i^f \mu_i \\ A_r = \sum \nu_i^r \mu_i \\ \dot{n}_i = v_i \dot{\xi}_i \end{array} \right. \quad (2.14)$$

Les transformateurs TF modélisent les transformations chimiques des réactifs en produits. Les modules correspondants de ces transformateurs ($1/v_i$) désignent les coefficients stœchiométriques de la réaction et les causalités affectées (μ_i, ξ_i connus).

En introduisant la relation qui relie le flux molaire et la vitesse d'avancement dans l'équation de Gibbs, on aura :

$$\dot{G} = \sum_{i=1}^m \mu_i \cdot \dot{n}_i = J \sum_{i=1}^m \nu_i \cdot \mu_i = J(A_f - A_r) = -JA \quad (2.15)$$

Le couple des variables de puissance est formé maintenant de deux nouvelles variables qui sont l'affinité chimique A et la vitesse de l'avancement de la réaction J .

En tenant compte des conditions de l'équilibre ($A = A_f - A_r = 0$), les constantes de vitesse des réactifs et des produits deviennent égaux à la constante thermodynamique à l'équilibre :

$$K(T_r) = k_f(T_r) e^{\frac{-A_{f0}}{RT_r}} = k_r(T_r) e^{\frac{-A_{r0}}{RT_r}} \quad (2.16)$$

avec A_{f0} et A_{r0} sont les affinités calculées à une température constante.

On obtient ainsi :

$$r_r^r = K(T_r) \left(e^{\frac{-A_f}{RT_r}} - e^{\frac{-A_r}{RT_r}} \right) = \Phi_{\mathbb{R}}(A_f, A_r, T_r) \quad (2.17)$$

Cette résistance multiport \mathbb{R} est non réciproque, la causalité ne peut s'inverser, autrement dit c'est une causalité conductance imposée (on déduit J à partir des efforts A_f et A_r). La vitesse de la réaction est gouvernée par la résistance pour laquelle, différentes théories de la cinétique chimique ont été élaborés [132] [133]. Le modèle bond graph du multiport \mathbb{R} déterministe est donné Fig. 2.7.

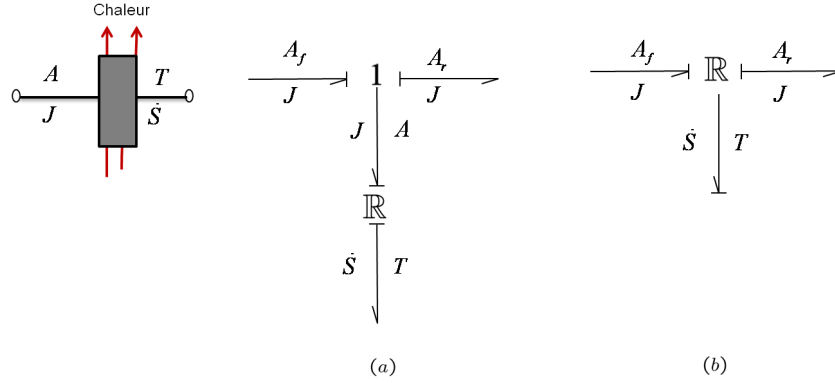


FIG. 2.7 – Représentation de la résistance chimique. (a) près de l'équilibre (b) loin de l'équilibre

Si on est loin de l'équilibre, la relation de la vitesse de réaction est plus complexe et dépend des affinités directes et inverses séparément $\Phi_{\mathbb{R}}(A_f, A_r, T_r)$. La jonction centrale 1 est remplacée par un multiport \mathbb{R} comme indiqué sur la figure 2.7 (b).

Du point de vue phénoménologique, la cinétique de la réaction peut être représentée par un élément résistif, dont la loi constitutive relie le flux J et l'effort A . Il est bien connu que, bien qu'une transformation chimique obéisse à la conservation de toute la masse, les réactifs chimiques ne sont pas conservés mais subissent une transformation dissipative lors de l'obtention d'un nouveau produit.

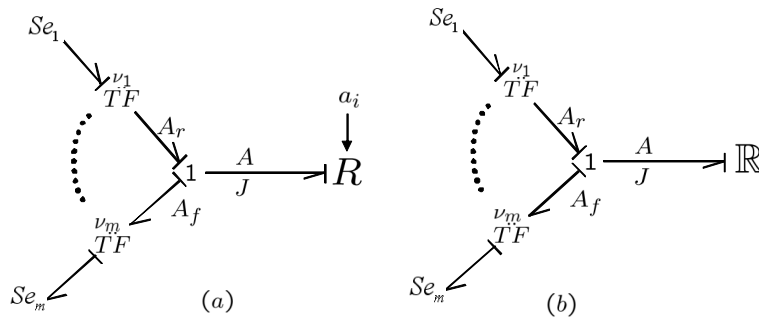


FIG. 2.8 – Modèle bond graph d'un système réactif (a) avec élément simple de résistance chimique modulée. (b) avec élément multiport de résistance chimique.

Accumulation d'énergie (Élément C, Multiport \mathbb{C}) Le système représente un multiport \mathbb{C} , emmagasinant de l'énergie interne U , dont la forme est exprimée en fonction de volume V , de l'entropie S et la variation du nombre du mole d'un constituant i , \dot{n}_i . Ce stockage d'énergie (énergie interne accumulée) peut se traduire par l'équation de Gibbs :

$$dU(S, V, n_i) = TdS - PdV + \sum_{i=1}^m \mu_i \cdot dn_i \quad (2.18)$$

La pression a pour conséquence en thermodynamique une variation de volume et la température une variation d'entropie tandis que le potentiel chimique est lié au transfert de matière. Ce transfert de masse est produit par une force motrice qui est la différence des tensions chimiques.

La relation 2.18 est représentée en bond graph par le multiport C à $m + 2$ ports comme indiqué sur la figure 2.22 : deux ports associant les puissances thermodynamique et hydraulique et m liens supplémentaires de puissance chimique avec les couples (potentiel chimique μ_i , flux molaire \dot{n}_i) comme couple effort-flux.

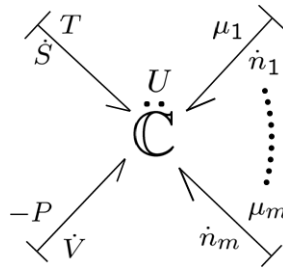


FIG. 2.9 – Element C multiport thermofluide d'un système chimique à masse variable.

Dans un système chimique, l'enthalpie libre de Gibbs $G(T, P, n_i)$ pilote la réaction tel que :

$$dG(T, P, n_i) = SdT - PdV + \sum_{i=1}^m \mu_i dn_i \quad (2.19)$$

Etant donné que la température T et la pression P constantes, la fonction de l'énergie libre de Gibbs G est donnée ainsi par l'expression :

$$dG(T, P, n_i) = \sum_{i=1}^m \mu_i dn_i \quad (2.20)$$

Ainsi, la transformation chimique et la variation de l'énergie interne du système réactif est représentée dans un modèle bond graph par des multiports en se basant sur ce qui a été développé auparavant pour le cas des systèmes non réactifs *J. Thoma (1992)* [134].

Il provient nécessaire d'utiliser les fonctions d'états et les relations réciproques de Maxwell pour déduire les lois constitutives du système par différentiation, ce qui assure que les éléments seront conservateurs d'énergie ou de co-énergie. Du point de vue bond graph l'énergie libre de Gibbs G est une co-énergie. Nous représentons le couplage des énergies par un lien entouré par un anneau comme indiqué sur la figure 2.10.

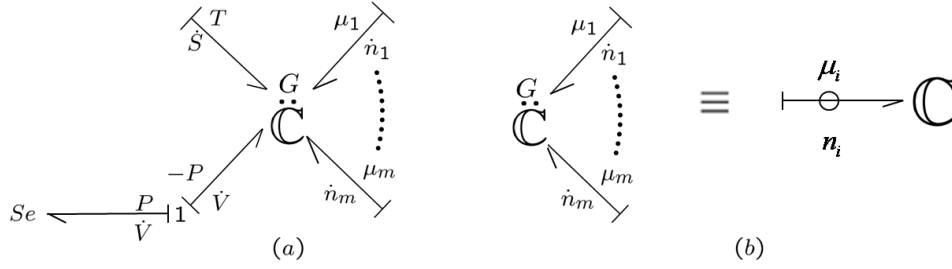


FIG. 2.10 – (a) Multiport \mathbb{C} accumulant l'énergie libre de Gibbs G . (b) Multiport accumulant l'énergie libre de Gibbs G où T, P sont constantes.

La loi constitutive du multiport \mathbb{C} est définie par une relation reliant l'effort μ_i au déplacement n_i comme suit :

$$\mu_i(n_i, T, P) = \left. \frac{\partial G}{\partial n_i} \right|_{T, P} = \mu_i^\circ + RT \ln(a_i(n_i)) \quad (2.21)$$

tel que la fonction représente l'activité du constituant i , et elle change de forme en fonction de la phase et la nature du mélange.

Dans le cas d'un mélange parfait, on aura :

$$\mu_i(n_i, T, P) = \left. \frac{\partial G}{\partial n_i} \right|_{T, P} = \mu_i^\circ + RT \ln(C_i) \quad (2.22)$$

Un modèle bond graph d'une réaction chimique près de l'équilibre est donné par la figure 2.11. L'accumulation d'énergie sous forme du potentiel chimique est modélisée par un multiport \mathbb{C} . Un multiport \mathbb{R} présente l'énergie dissipée sous forme d'énergie thermique vers le milieu réactionnel puisque la réaction est supposée exothermique. La transformation de puissance est présentée par les transformateurs TF .

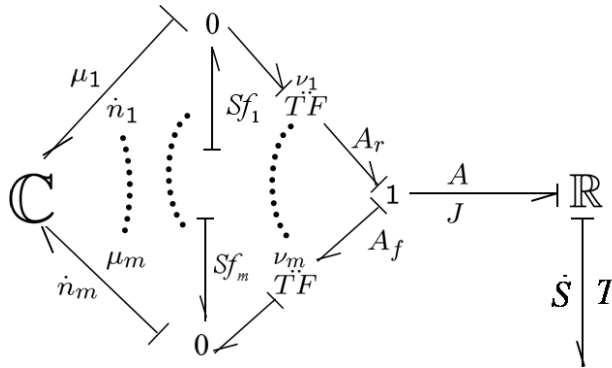


FIG. 2.11 – Modèle Bond Graph d'une réaction chimique près de l'équilibre

Couplage des énergies dans un système chimique Considérons un mélange de débit \dot{m} , formé de p constituants avec une fraction molaire x_p et de masse molaire M_p . Ce cas est présent dans les transformations physico-chimiques. A titre d'exemple un procédé de distillation atmosphérique du pétrole. Le pétrole rentre dans la colonne sous forme d'un mélange, on soutire sur chaque plateau un constituant. Afin de considérer chaque constituant à l'entrée, on propose un élément qu'on appellera « Démultiplexeur chimique »

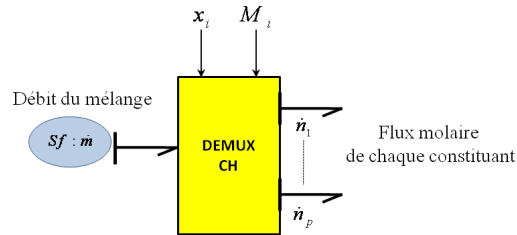


FIG. 2.12 – Calcul des débits molaire dans le cas d'un mélange

Le schéma bloc de calcul est donné par la figure 2.12. Le bloc est considéré comme un démultiplexeur afin d'extraire le débit molaire de chaque constituant du mélange. Le modèle bond graph de ce démultiplexeur peut être représenté par des transformateurs permettant de calculer des débits molaires connaissant le débit massique. Les modules de ces transformateurs sont le rapport x_i/M_i . Le modèle pseudo bond graph est donné par figure 2.13.

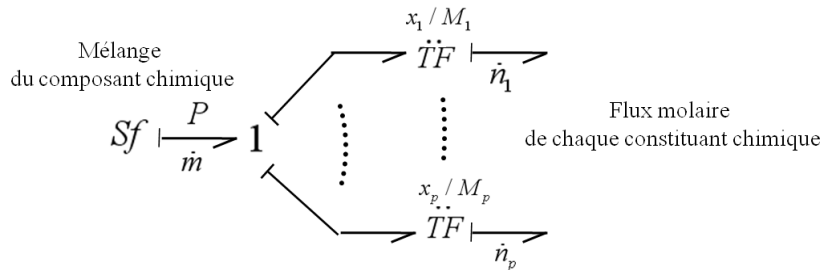


FIG. 2.13 – Modèle bond graph du demultiplexeur chimique d'un mélange

Les relations constitutives des transformateurs sont écrites uniquement pour les flux, tel que :

$$\dot{n}_i = \dot{m} \frac{x_i}{M_i}$$

x_i est la fraction molaire du constituant i .

M_i est la masse molaire du constituant i [kg/mole].

\dot{n}_i est la débit molaire du constituant i [mole/s].

p_i est la pression partielle du constituant i .

Exemple:

Considérons un réacteur chimique alimenté par un mélange de débit \dot{m}_{in} et ayant p constituants, figure 2.14.

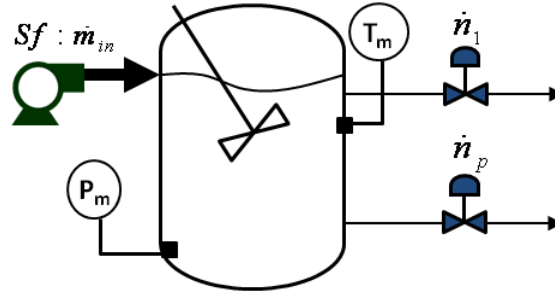


FIG. 2.14 – Schéma d'un réacteur chimique alimenté par un mélange de p constituants

Dans ce système thermofluide, le couplage des deux énergies (hydraulique et thermique) est quantifié par l'équation 2.23.

$$\dot{H} = F(\dot{m}, T) \quad (2.23)$$

A travers cette équation, on voit que le flux thermique est une fonction du flux hydraulique et de l'effort thermique :

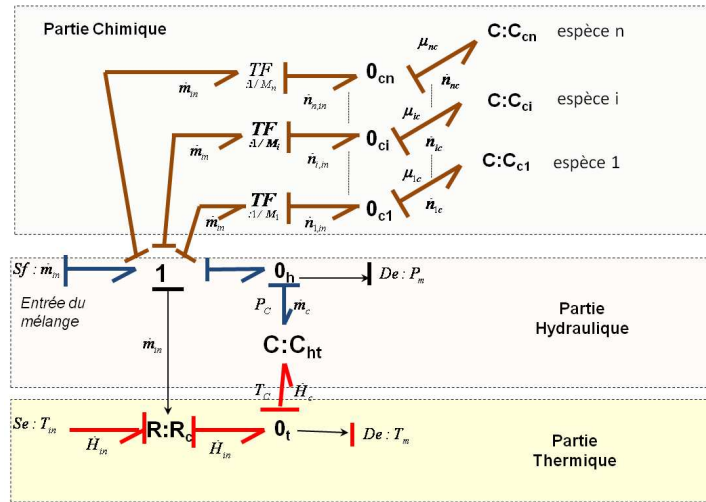
$$f_t = F(f_h, e_t) \quad (2.24)$$

Dans la littérature *Karnopp & al. (1981)* [135], ce couplage est modélisé en introduisant une résistance fictive R_c sur le lien thermique modulée par le débit fourni par le lien hydraulique (figure 2.15).

Une autre complexité peut être ajoutée tenant compte le phénomène de la transformation de la matière dans la réaction chimique.

Le mélange de flux massique \dot{m}_{in} , figure 2.15, est formé de n espèces chimiques. Les n transformateurs physico-chimiques sont utilisés pour transformer le flux massique \dot{m}_{in} en flux molaire $\dot{n}_{i,in}$ de chaque espèce i . Les rapports $1/M_i$ [kg/mole] sont les modules de ces transformateurs.

$$\dot{n}_{i,in} = \frac{\dot{m}_{in}}{M_i}$$

FIG. 2.15 – *Découplage de différentes énergies*

C_{cn} représente le stockage d'énergie chimique de chaque espèce i avec i varie de 1 jusqu'à n espèces. Ces capacités chimiques peuvent être regroupées dans une capacité totale appelée la capacité chimique C_c .

De cette façon, les trois ports C_{htc} (représentant le stockage d'énergie hydraulique, thermique et chimique) est découplés dans la capacité hydraulique, thermique et chimique, figure 2.16.

L'élément multiport C_{htc} qui regroupe toutes les capacités des différents domaines énergétiques (hydraulique, thermique, chimique), ainsi que l'ensemble des jonctions 0 qui représentent les trois bilans de conservations, Fig. 2.16. Cependant, il faut souligner aussi que l'élément multi ports C_{htc} sera employé pour les autres types des réactions homogènes, car sa structure et ses relations constitutives ne dépendent pas du mode de fonctionnement, mais beaucoup plus des conditions opératoires et de l'état physique du mélange. Dans la figure 2.16, $De : P_m$ et $De : T_m$ sont respectivement des détecteurs d'effort et de flux.

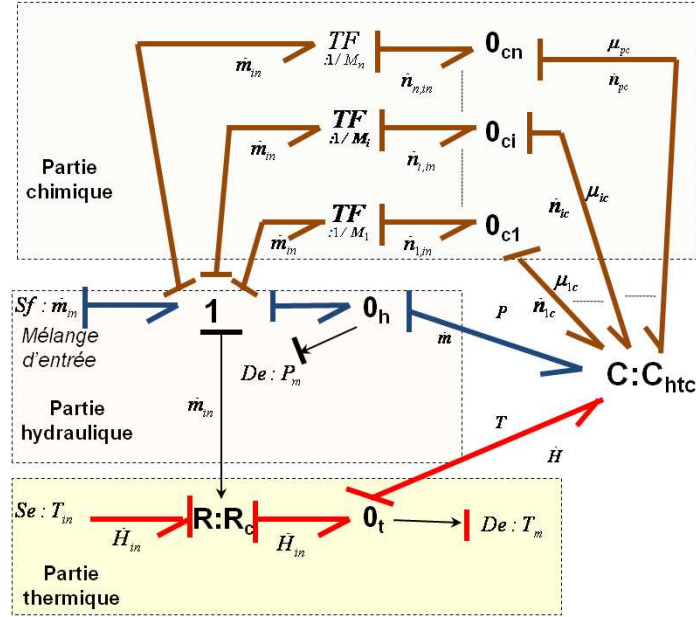


FIG. 2.16 – Modèle Bond Graph avec le couplage de trois énergies dans une réaction chimique

Le vecteur d'état est constitué des variables d'énergies suivantes :

$$X = [n_{c1}, \dots, n_{cp}, H, m] \in R^{P+2}$$

où:

p est le nombre de constituant du mélange.

n_{ic} est le nombre de moles du constituant i .

m est la masse totale du mélange stocké.

H est l'enthalpie totale qui représente l'énergie interne du mélange.

2.4.1.2 Modélisation de la thermodynamique chimique

Analysons maintenant l'aspect thermodynamique de la réaction chimique. Lors de déroulement d'une réaction, la dynamique de la réaction est généralement accompagnée par des phénomènes de nature thermique (dégagement de chaleur, rayonnement) ou électrochimique (diffusion). Le facteur température influe sur la cinétique et le transfert thermique. Le constituant se comporte ainsi comme une capacité multiport \mathbb{C} qui échange de la matière avec le milieu extérieur sous forme de flux molaire, cet échange de matière va entraîner par conséquence un échange de chaleur représentée par le flux d'entropie \dot{S} et un échange de travail représenté par le débit volumique \dot{V} .

En outre, le produit de l'affinité chimique totale A par la vitesse d'avancement constitue une puissance qui se dissipe dans le champ RS_c et génère ainsi de l'entropie (puissance

chimique = puissance thermique). Le multiport RS_c absorbe alors de la puissance chimique et produit une quantité équivalente de puissance égale au produit de flux d'entropie par la température absolue. Le multiport RS_c est considéré à la fois comme une résistance chimique et une source d'entropie \dot{S}_{gen} . La création d'entropie est engendrée par la cinétique de la réaction; et le phénomène de dissipation de la puissance chimique dû aux phénomènes irréversibles de la réaction. D'où, un flux de chaleur (puissance du système chimique) apparaît et sera donc représenté par :

$$\dot{Q} = T\dot{S} = T\dot{S}_s + T\dot{S}_{gen} = J_i \left(\sum_{i=1}^k v_i^f h_i - \sum_{i=1}^m v_i^r h_i \right) \quad (2.25)$$

tel que $T\dot{S}_s$ est le flux d'entropie de réaction provient de la différence entre l'entropie des réactants (entropy stripped) et celle des produits de la réaction (unstripped). $T\dot{S}_{gen}$ est le flux d'entropie générée par la réaction modélisée par RS_c . h_i est l'enthalpie spécifique de chaque constituant i .

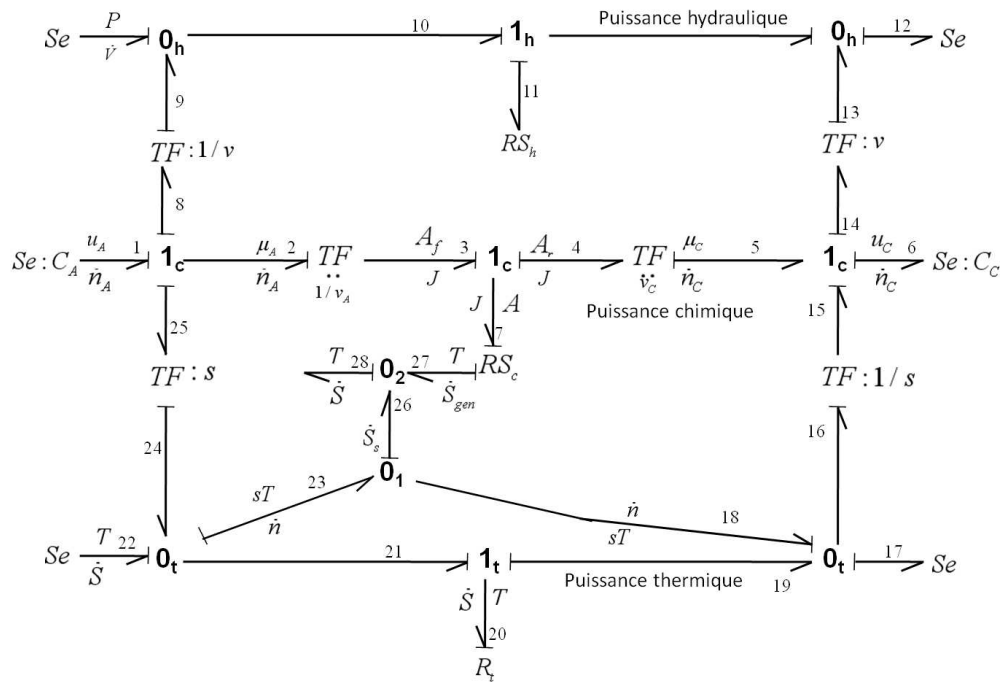


FIG. 2.17 – Modèle bond graph global de la réaction chimique en tenant compte des phénomènes thermodynamiques.

On considère le mélange composé des constituants A et C . Il se déroule dans ce mélange une réaction simple sous la forme suivante :



Le modèle Bond graph du système est illustré par la figure 2.17. Les liens de puissance couplés portent ici les paires des variables (P, \dot{V}) , (T, \dot{U}) et (μ, \dot{n}) associant respectivement les puissances hydraulique, thermique et chimique.

Le système est soumis à deux forces d'effort (de pression et de température). Les éléments transformateurs TF modulés par les densités d'entropie s et de volume v constitutives, en fonction des causalités affectées sont dans notre cas :

$$P_9 = vP_8, \quad T_{25} = sT_{24}, \quad \dot{V}_9 = v\dot{V}_8 \quad (2.27)$$

Les paramètres s et v (modules de transformateurs) désignent respectivement l'entropie par masse (ou densité d'entropie) et le volume massique. Ces paramètres permettent aussi de lier le flux d'entropie ou le flux volumique au flux molaire par les relations suivantes :

$$\dot{S}_{24} = s \dot{n}_2, \quad \dot{V}_9 = v \dot{n}_2 \quad (2.28)$$

Toutefois, en général dans les phénomènes physico-chimiques, les grandeurs s et v sont exprimées par les relations des dérivés partielles suivantes :

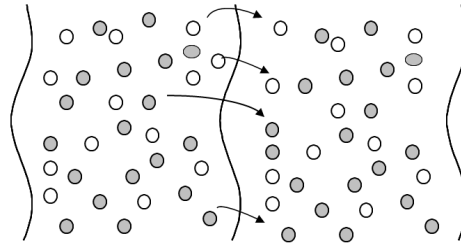
$$s = \frac{\partial S(P, T, n)}{\partial n}, \quad v = \frac{\partial V(P, T, n)}{\partial n} \quad (2.29)$$

La jonction 1 montre que l'entropie et le volume sont entraînés et réinjectés dans leurs liens respectifs. L'équation des efforts de transformateurs montre la transition entre l'énergie interne par volume ($u = U/n$) et la tension chimique. En tenant compte des relations (2.29) entre les efforts du transformateur, l'équation constitutive de la jonction 1 est une transformation de légende donnée par l'équation de conservation des puissances suivante :

$$\mu_2 = u_1 - sT_{24} + vP_9 \quad (2.30)$$

2.4.1.3 Modélisation du phénomène de diffusion

La diffusion désigne la tendance naturelle d'un système à rendre homogènes les concentrations des espèces chimiques en son sein. C'est un phénomène de transport irréversible qui se traduit par la migration d'espèces chimiques dans un milieu. Sous l'effet de l'agitation thermique, on observe un déplacement des constituants des zones de forte concentration vers celles de faible concentration. D'un point de vue phénoménologique, et au premier ordre, ce phénomène est régi par une loi de Fick.

FIG. 2.18 – *Phénomène de transport de matière : diffusion/ migration*

Considérons un système chimique. A basse température le système est figé et les molécules sont immobiles. Par contre, si la température est suffisamment élevée, sous l'effet de l'agitation thermique, les atomes sont mobiles et ils peuvent se déplacer. Ils sont alors soumis au phénomène de diffusion : une non-uniformité des variables thermodynamiques (une variation de la concentration le plus fréquemment) et un transport de matière (un déplacement des atomes A). La diffusion est donc un processus non réversible dont la "force motrice" est le gradient de potentiel chimique et qui a pour objectif d'uniformiser ce potentiel chimique. La description générale de ce processus est donnée par la figure 2.18.

Le gradient de potentiel chimique est la variation de l'enthalpie libre du système lorsque l'on fait varier le nombre de moles de l'espèce i dans l'espace, toutes choses restant égales par ailleurs :

$$\overrightarrow{\text{grad}} \mu_i = \overrightarrow{\text{grad}} \left(\frac{\partial G}{\partial n_i} \right)_{P,T,n_{j \neq i}} \quad (2.31)$$

Pendant, dans le cas le plus simple, soit un milieu B dans lequel se trouve une espèce chimique A. Cette seule espèce diffusante est soumise uniquement à son gradient de concentration, le phénomène se décrit très simplement à l'aide de la première loi de Fick, selon laquelle le flux d'impureté \overrightarrow{j}_A (nombre d'atomes traversant l'unité de surface S par unité de temps ou vecteur densité de courant de particules, appelé aussi le flux de particules) est proportionnel (en valeur absolue) au gradient de concentration C de constituant :

$$\overrightarrow{j}_A = -D_{AB} \overrightarrow{\text{grad}} C_A \quad (2.32)$$

La grandeur D_{AB} est le coefficient de diffusion de A dans le milieu B considéré; il dépend de la température, du milieu et de A. Le flux donné par la première équation de Fick est alors parallèle au gradient de concentration.

Dans le cas unidimensionnel (par exemple en se plaçant sur l'axe des x), la première loi de Fick se réduit à :

$$j_{Az} = -D_{AB} \frac{\partial C_A}{\partial x} \quad (2.33)$$

Il existe plusieurs façons pour traiter la diffusion dans une réaction chimique, plusieurs travaux considèrent que la constante de vitesse globale d'un phénomène physico-chimique

est composée en deux constantes de vitesse, l'une est associée à la réaction par diffusion et l'autre au phénomène chimique. Lorsque le taux de diffusion est relativement élevé, l'effet de la cinétique chimique est supposé dominant. Mais, lorsqu'on considère la mobilité des molécules, la constante de vitesse globale dépend de la diffusion. Alors, dans ce cas, elle est la somme de la constante de vitesse de diffusion k_{diff} et de la réaction chimique k_{chem} , donnée par l'équation d'arrhenius.

Dans le modèle de concentration de Fick, \bar{c} (mol/cm^3) remplace le potentiel chimique comme un effort. Les équations constitutives pour les résistances et les capacités restent inchangées, avec l'avantage que les capacités chimiques seront définis constantes, comme discuté ci-dessous.

Dans un modèle de fick, le produit d'effort et du flux ne définit pas de puissance, le traitement doit être considéré comme pseudo-thermodynamiques. Il est nécessaire d'établir la relation entre les résistances, les capacités, les coefficients de diffusion et les concentrations. Le débit, f (mol/cm^2), à travers une couche l (cm) et une surface A (cm^2) et définit par

$$f = \bar{D} A \frac{\Delta \bar{c}}{l} \quad (2.34)$$

où \bar{D} est le coefficient de diffusion (cm^2/sec) et $\Delta \bar{c}$ (mol/cm^3) est la différence de concentration locale dans le milieu de diffusion et correspond à l'effort dans la résistance de la jonction 1, figure 2.19. Puisque l'effort est défini par $\Delta \bar{c}$, la résistance est donnée par $R = \frac{l}{\bar{D} A}$.



FIG. 2.19 – Modélisation de phénomène de diffusion dans une réaction chimique

Cette équation est suffisante pour un système monophasique, mais pour des problèmes de diffusion hétérogènes, tels que ceux de processus de diffusion via des membranes avec des solutions ou des gaz, ou dans lequel il y a structures de couches, il est utile de définir un effort commun pour toutes les phases. Cette effort est démontré comme étant la concentration de la solution d'équilibre, c , qui peut être calculés, même pour les tranches, les morceaux ou les couches éloignées de solution de contact réel, via le coefficient de distribution α .

$$\alpha = \frac{\bar{c}}{c} \quad (2.35)$$

A partir des équations 2.34 et 2.35, la perméabilité d'une couche P d'épaisseur l est défini par:

$$f = P \Delta c$$

avec $P = \bar{D} A\alpha/l$, alors l'expression de la résistance est

$$R = P^{-1} = l/\bar{D}A\alpha$$

Le flux d'entrée est

$$\dot{q} = f = \frac{dn}{dt} = \bar{V} (d\bar{c}/dt)$$

Donc, la capacité C est défini comme suit

$$C = \bar{V}\alpha$$

2.4.1.4 Modélisation du phénomène électrochimique

Les réactions électrochimiques sont les phénomènes qui ont lieu à l'interface de deux systèmes conducteurs (électronique et ionique) lors du transfert de charge composé de un ou plusieurs électrons. Ces transferts de charges s'accompagnent de modification des états d'oxydation des matériaux (oxydation ou réduction) et donc de leur nature physico-chimique (dépôt métallique, évolution de gaz, formation d'espèces radicalaires, réactions chimiques couplées...). L'ensemble des réactions élémentaires peut ainsi atteindre un haut niveau de complexité. Alors les phénomènes électrochimiques sont des phénomènes chimiques couplés à des échanges réciproques d'énergie électrique.

Les piles à combustibles sont des générateurs électrochimiques qui réalisent une conversion directe, éventuellement réversible, d'énergie chimique en énergie électrique. En effet, d'un point de vue général, cette conversion exploite l'énergie mise en jeu lors d'une réaction chimique d'oxydo-réduction par échange d'électrons entre réactifs. Cela implique une transformation des réactifs inévitablement accompagnée de phénomènes de transport de matière par diffusion, migration..., qui ne peuvent être négligés, même en première approximation, car ils sont déterminants dans le processus même de conversion. Il en est de même des aspects thermiques, en raison du rôle déterminant de la température dans ces phénomènes de transport et dans la cinétique chimique.

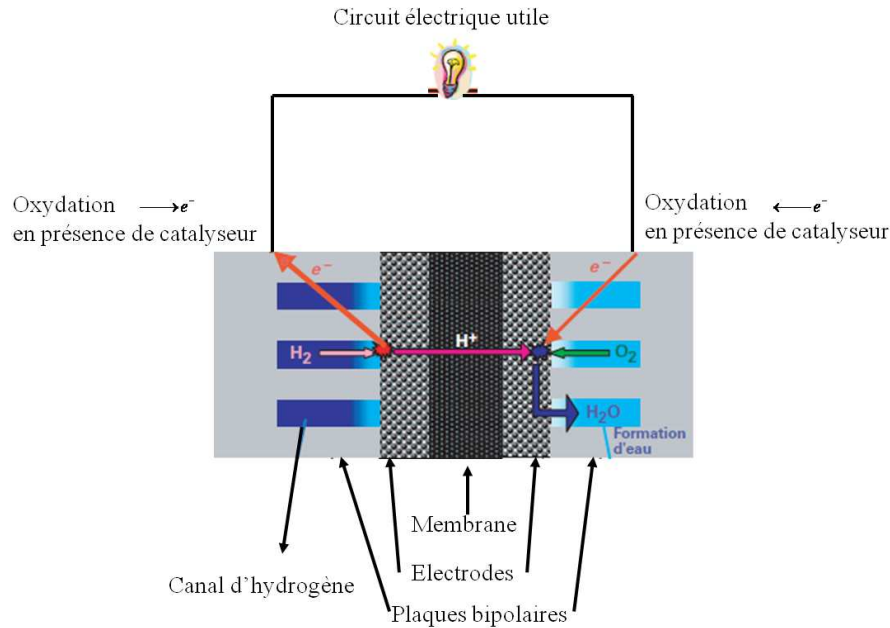


FIG. 2.20 – Pile à combustible PEM

La réaction d'oxydo-réduction à pression et température données entre un combustible et un comburant met en jeu une énergie totale évaluée par la chaleur à pression constante Q_p qui s'identifie à la variation d'enthalpie ΔH . Cependant, conformément au 2^e principe de la thermodynamique, seule une partie de cette énergie totale est convertible en travail, elle-même fonction des conditions internes et de celles imposées par l'environnement. Ainsi, à l'équilibre thermodynamique, dans les conditions de pression et de température imposées et en négligeant l'influence des autres champs de potentiel (électromagnétique et gravitation), cette énergie maximale récupérable (exergie) s'identifie à la variation d'enthalpie libre de la réaction considérée (énergie libre de Gibbs).

Cette énergie libre est récupérée sous forme électrique par un procédé électrochimique mettant en œuvre une cellule électrochimique constituée de deux électrodes, siège des oxydations ou réductions, séparées par un électrolyte, conducteur ionique et isolant électronique. Les électrons sont ainsi échangés à travers le circuit électrique extérieur reliant les deux électrodes, siège de l'énergie électrique fournie ou absorbée.

Mais la réaction implique la transformation des réactifs et le convertisseur électrochimique se trouve alors hors de l'équilibre thermodynamique car son évolution implique des flux de charges et de matière non nuls.

Les phénomènes mis en jeu concernent particulièrement les transferts de charge et les cinétiques des réactions chimiques, les transports de matière par diffusion et migration sous l'effet de gradients électriques ou thermiques et de concentration des espèces chimiques. Ces

phénomènes dissipatifs sont déterminants pour la conversion et limitent les fonctionnements aux puissances élevées loin de l'équilibre. Ils sont fortement non linéaires et présentent des comportements cinétiques et dynamiques très différents, si bien que la définition même de régimes statiques est délicate. L'hypothèse classique de l'équilibre local associée au découplage des modes fréquentiels permet cependant de considérer différents états quasi stationnaires et de définir les grandeurs thermodynamiques, chimique et thermocinétique dans le cadre de différentes hypothèses de modélisation.

Considérons la réaction d'oxydo-réduction produisant le réactif M , caractérisée par une enthalpie libre standard ΔG^0 et z moles d'électrons échangées par mole de réactif M produite. La charge électrique correspondante vaut :

$$q = -zF$$

avec F constante de Faraday représentant la charge d'une mole d'électrons en valeur absolue.

La conservation de l'énergie lors de cette conversion électro-chimique idéale s'exprime donc par la relation:

$$E.I = -\xi.\Delta G$$

ξ est la vitesse de la réaction, ΔG est une énergie reçu par convention, E est le potentiel électrique.

Il découle des équations précédentes que la conversion électrochimique est représentée en BG par un élément TF de rapport représentant le passage du domaine chimique au domaine électrique dans les conditions idéales de la forme :

$$\begin{array}{c} \xrightarrow[-\xi]{-\Delta G} \text{TF} \xrightarrow[I]{E} \end{array}$$

Les relations constitutives du transformateur TF modulé par zF sont:

$$\begin{cases} i = zFJ \\ e = A/zF \end{cases}$$

La puissance chimique $A.J = -\Delta G.\xi$ va se transformer en deux formes de puissance électriques et thermiques.

Les phénomènes d'activation et de transfert de charge qui participent à la cinétique de la réaction sont, pour la plupart, dissipatifs et causent des chutes de tension en fonctionnement générateur (appelées « surtensions aux électrodes »). Ils sont donc modélisés par des éléments RS reliés à la fois à la partie électrique (comportement résistif dont la caractéristique non linéaire suit une loi de Butler-Volmer) et à la partie thermique comme sources de chaleur.

Il en est de même de l'électrolyte représenté par un élément RS , à l'origine d'une chute de tension et de pertes par conduction ionique.

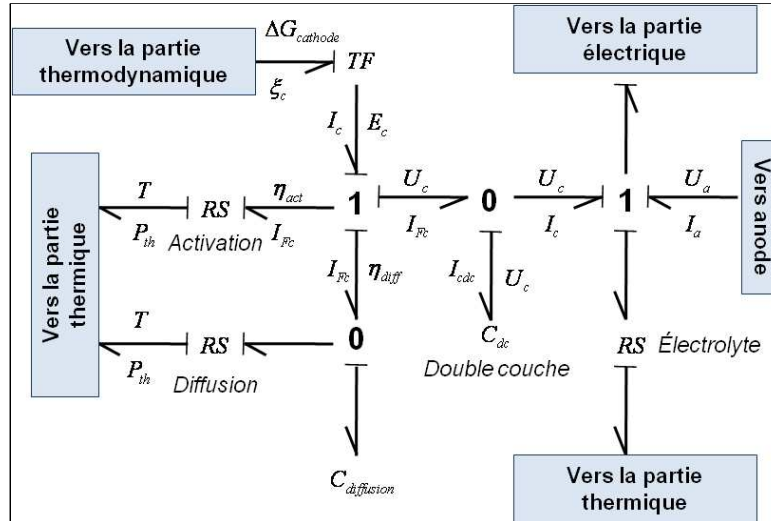


FIG. 2.21 – Modèle bond graph détaillé de cathode

Sur la figure 2.21, on observe que le courant délivré par la pile est la somme du courant faradique résultant de la réaction chimique proprement dite et du courant de la capacité de double couche I_{cdc} (jonction zéro). Les liens thermiques correspondent respectivement à la température T et à la puissance thermique P_{th} (au lieu du flux d'entropie). C_{dc} est la capacité de double couche. I_{Fc} est le courant faradique cathode.

La modélisation présentée par la figure 2.21, introduisant la diffusion, met en évidence plusieurs constantes de temps liées à la diffusion d'une part et à la double couche électrique d'autre part, l'ensemble étant couplé à l'activation. En régime dynamique, la tension globale d'électrode U_c apparaît donc imposée par la capacité de double couche C_{dc} en fonction de son état de charge et l'on peut imaginer lui faire jouer le rôle de filtre dans une interaction entre la pile et un convertisseur statique. La double couche est insérée entre chaque électrode et l'électrolyte.

On y intègre également les pertes liées aux conceptions électroniques dans les plaques bipolaires et autres connexions. En outre, les électrodes poreuses assurent l'accès des gaz par diffusion aux sites réactionnels imprégnés de catalyseurs. On ne considère les phénomènes de diffusion que du côté oxygène, donc à la cathode car ils sont prépondérants. Ces phénomènes de diffusion peuvent être pris en compte directement dans la loi de Butler-Volmer.

2.4.1.5 Modélisation des réactions secondaires

Lors du déroulement d'une réaction chimique simple (réversible ou irréversible), d'autres liaisons chimiques peuvent apparaître. Ces réactions sont appelées parallèles et concurrentes, car elles se déroulent en parallèle à la réaction principale. En pratique, ces réactions secondaires sont généralement indésirables.

De ce fait provient notre intérêt de développer à travers cette partie, les éléments bond graph nécessaire pour permettre de définir par la suite une approche aisée et méthodique pour la modélisation de ce type de réactions.

Réactions composés Au cours d'une transformation chimique, plusieurs réactions élémentaires peuvent avoir lieu simultanément ou successivement. On appelle réactions composées des ensembles de réactions élémentaires qui se combinent selon un des trois schémas simples suivants: série, opposé ou parallèle.

- **Réactions séries** : Le ou les produit(s) d'une réaction peuvent eux même être les réactifs d'une autre réaction. Cela constitue un système de réactions dites séries. Pour une réaction possédant plusieurs étapes, la vitesse globale de formation du produit final est déterminée par la vitesse de l'étape la plus lente.

- **Réactions opposées** : Certaines réactions peuvent se produire dans les deux sens. On les appelle des réactions opposées. Dans ce cas, le système évolue vers un état d'équilibre dynamique. Du point de vue macroscopique, la réaction semble terminée puisque la composition du système ne varie plus. Le taux d'avancement est alors compris entre 0 et 1 et la réaction n'est pas totale. Mais du point de vue microscopique les réactions directes et inverses continuent de se produire avec des vitesses égales.

- **Réactions parallèles** : On appelle réactions parallèles des systèmes de réactions distinctes qui ont les mêmes réactifs mais des produits différents. La vitesse de transformation des réactifs est alors la somme des vitesses de chacune des réactions.

Le principal danger d'un emballement de température est l'amorçage de réactions secondaires en plus de la réaction désirée, notamment des réactions de décompositions des réactifs ou des produits. Ce type de réactions est très exothermique, c'est à dire qu'il produit une très grande chaleur. De plus, les réactions de décompositions produisent en grande partie des gaz. Les gaz sont dangereux pour deux raisons : la première consiste en une augmentation de la pression dans le réacteur, augmentation qui peut conduire à l'explosion du réacteur. La deuxième raison de la dangerosité des gaz est leur possible inflammation, notamment si la surpression dans le réacteur a conduit à un dégagement via une rupture dans l'étanchéité du réacteur. Les solvants représentent le même danger du fait de leur volatilité et de leur inflammabilité. Nous allons distinguer parmi celles-ci :

- **Les réactions par stade ou à séquence ouverte** : ce sont des successions de réactions

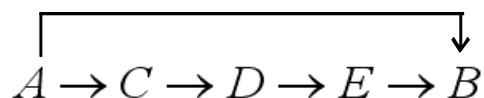
élémentaires dans lesquelles un intermédiaire réactionnel crée dans une réaction élémentaire disparaît au cours d'une autre réaction élémentaire.

• **Les réactions en chaînes** : dans lesquelles un intermédiaire est consommé puis régénéré au cours d'une autre réaction élémentaire.

Si, dans une réaction élémentaire, un intermédiaire réactionnel ne donne naissance qu'à un seul intermédiaire, assurant ainsi le transfert d'énergie, nous parlerons de réactions en chaînes linéaires. S'il y a formation de plusieurs intermédiaires à partir d'un seul, on parle de **réactions en chaînes ramifiées**, caractéristiques des réactions explosives.

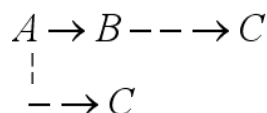
La transformation d'un réactif A en un produit B ne se fait pas toujours directement, mais peut passer par des intermédiaires stables et éventuellement isolables.

Dans ce cas :



La transformation A-B se fait en quatre étapes et met en jeu trois intermédiaires, produits dans trois **réactions successives (par stade)** (C'est le cas de la chloration du méthane en tétrachlorure de carbone qui passe par l'intermédiaire du chlorure de méthyle, du chlorure de méthylène et du chloroforme).

Le produit B, même s'il est formé en une seule étape, peut être accompagné d'un autre produit C (ou de plusieurs autres). Cet autre produit peut résulter de la transformation de B ou se former en même temps que lui dans une réaction parallèle. On a alors :



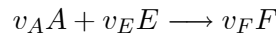
Le produit C est appelé coproduit, sous produit ou produit annexe.

Le terme coproduit est généralement employé lorsque le produit est, en quantité et en valeur, comparable au produit principal. On réserve le nom de sous produit ou produit annexe au produit indésirable sur le plan économique et dans la valorisation pose des problèmes. Lorsque le sous produit est sans valeur commerciale et doit être éliminé, il s'agit d'un déchet.

Les réactions en chaînes ramifiées sont généralement des réactions fortement exothermiques puisqu'elles correspondent à une transformation en un état thermodynamiquement plus stable. Cependant, ainsi qu'il a été discuté plus haut, dans des conditions cinétiques déterminées, l'évolution peut se faire de façon isotherme par multiplication du nombre de radicaux libres ; la formation de ces derniers compense l'exothermicité du processus considéré dans l'ensemble, c'est-à-dire avec recombinaison des fragments radicalaires et établissement de l'équilibre dans les produits de réaction. Mais en général, dans des conditions opératoires normales, le dégagement de chaleur se produit dès les premiers instants de la réaction et

la température du système croît constamment, il en résulte une accélération continue de la vitesse de réaction et du dégagement de chaleur. Cependant la vitesse finit par diminuer, par suite de l'épuisement du milieu réactionnel en réactif initiaux.

Modélisation des réactions parallèles Sur un modèle bond graph, tel que présenté sur la figure 2.22, une réaction parallèle formée par la combinaison du réactif initiale A avec le corps E pour produire un autre produit F selon la réaction



est accouplée à la réaction principale donnée ci-dessus ($v_A A \rightleftharpoons v_C C$) par une jonction 0 (parallèle).

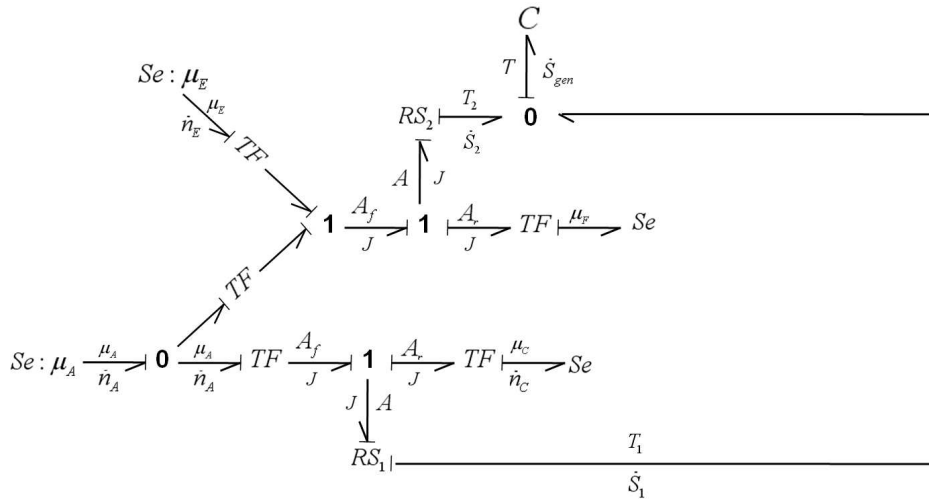
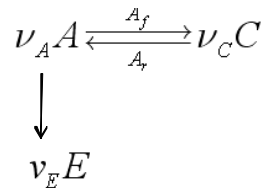


FIG. 2.22 – Modèle Bond Graph d'une réaction parallèle.

Modélisation des réactions en chaînes ramifiées (réactions d'emballement thermiques) L'équation suivante est une réaction simple où un réactif A donne un produit C, au cours de cette réaction se produit une réaction ramifiée qui donne naissance à un produit indésirable E.



Le modèle Bond Graph de cette réaction en chaînes ramifiées est donné par la figure 2.23.

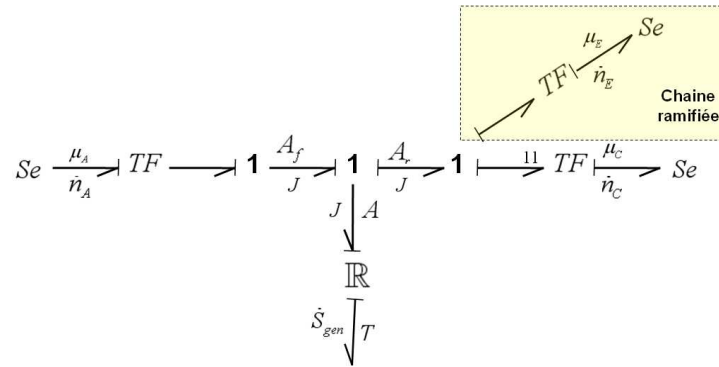


FIG. 2.23 – Modèle Bond Graph d’une réaction en chaînes ramifiées.

2.4.2 Modélisation des réacteurs chimiques

Selon les travaux réalisés jusqu’à présent concernant la modélisation des réacteurs chimiques, on peut distinguer deux manières de procéder à la représentation de ce type d’équipements, en ce sens, les différences entre les deux démarches sont liées particulièrement aux choix des variables de puissance et la procédure d’extraction des lois constitutives. Dans ce qui va suivre, on va évoquer en détail chacune de ces démarches, et les travaux élaborés.

Dans les premiers travaux traitant les systèmes fermés non réactifs *D. Karnopp (1990)* [136], les variables de puissances choisies effort-flux correspondent respectivement aux variables intensives et aux flux des variables extensives [129]. Le modèle vrai bond graph qu’on peut citer est celui traité dans *F. Couenne & al. (2008)* [124] et *F. Couenne & al. (2006)* [1]. Dans son travail, l’auteur traite le cas d’un CSTR dans lequel se trouve un mélange de gaz parfaits où se déroule une réaction réversible $v_A A + v_B B \rightleftharpoons v_C C + v_D D$ sous une pression P et V volume constant. Le mélange est considéré homogène et le réacteur est isotherme et parfaitement agité.

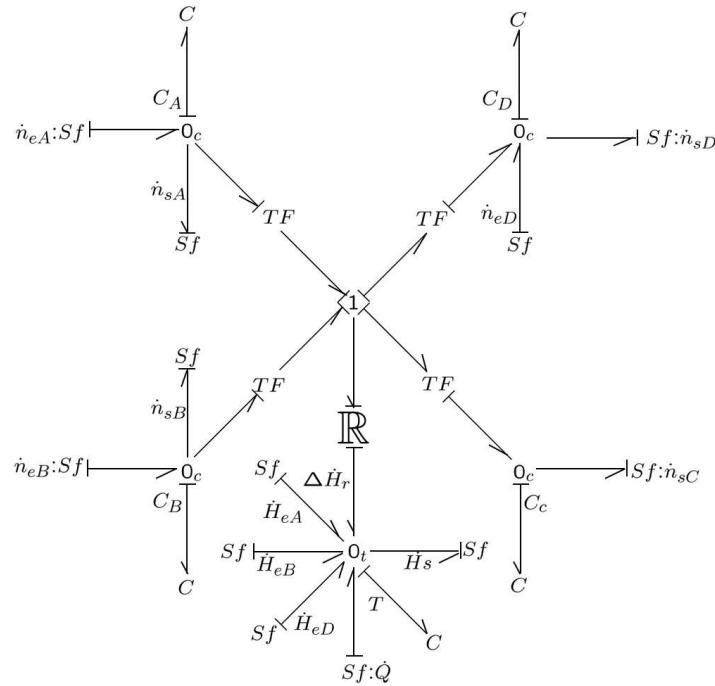


FIG. 2.25 – Modèle pseudo bond graph d'un CSTR.

Bien que cet exemple représente un intérêt pour la simulation vue sa simplicité, mais présente certaines limitations au niveau des transformations chimiques qui apparaissent dans certains cas, à savoir le cas des réacteurs électrochimiques. Dans ce dernier cas on a besoin d'informations concernant la dynamique de réaction qui se manifeste par l'énergie libre de Gibbs G et l'affinité chimique de la réaction A , qui représente la force motrice de la réaction.

Un autre cas est celui des réactions catalytiques ou réversibles, où la dynamique de la réaction représentée par l'énergie libre de Gibbs G est nécessaire pour choisir le catalyseur ou l'inhibiteur pour anticiper et éviter les zones d'équilibre chimiques qui représente des zones mortes de non production.

La représentation d'un procédé est habituellement accompagnée d'un bilan matière et des bilans enthalpiques des appareils où s'effectue un transfert calorifique.

2.4.3 Cas général: Bilan d'espèce

À l'instar des autres équations de bilans, on va évoquer tout d'abord le cas des réacteurs à paramètres localisés, où on considère la présence de k réactions chimiques $R_j = \{R_1, \dots, R_k\}$ qui se déroulent dans un mélange réactionnel bien agité. Suite à l'hypothèse de l'équilibre thermodynamique global citée au début, le potentiel chimique μ_i de chaque constituant est uniforme dans tout le mélange. On a les concentrations C_{ei} et les flux molaire \dot{n}_{ei} des constituants à l'entrée du réacteur, les concentrations C_i et les flux molaire \dot{n}_{si} des constituants à

la sortie du réacteur.

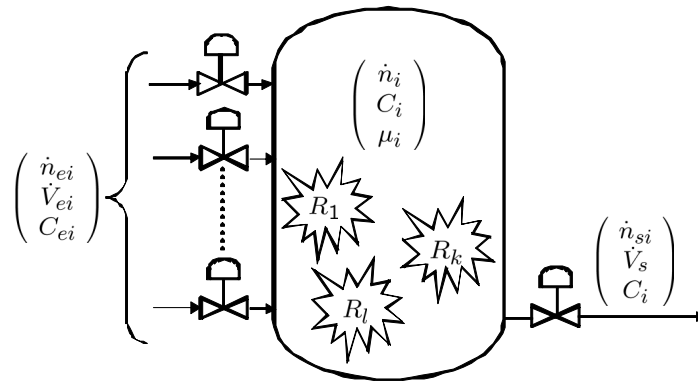


FIG. 2.26 – Schéma général d'un réacteur homogène en domaine chimique

En ce qui concerne le modèle bond graph du domaine chimique, Fig.2.26, l'usage de l'élément \mathbb{RCH} (c'est un élément multiport désigne la **R**ésistance **CH**imique et qui englobe à la fois, la dissipation d'énergie (\mathbb{R}) et la transformation de puissance (TF)) qui a été présenté auparavant [128], a permis de représenter la transformation chimique d'une façon détaillée, toute en tenant compte de la cinétique et la stœchiométrie des réactions en cours.

À propos de l'élément capacitif C , il reflète la présence d'un phénomène de stockage de l'énergie chimique nécessaire pour l'évolution des réactions, où la relation constitutive de cet élément relie le potentiel chimique et le flux molaire, dont la forme varie en fonction de l'état physique du mélange (mélange gaz, mélange liquide). Nous représentons le couplage des énergies par un lien entouré par un anneau comme indiqué sur la figure 2.27.

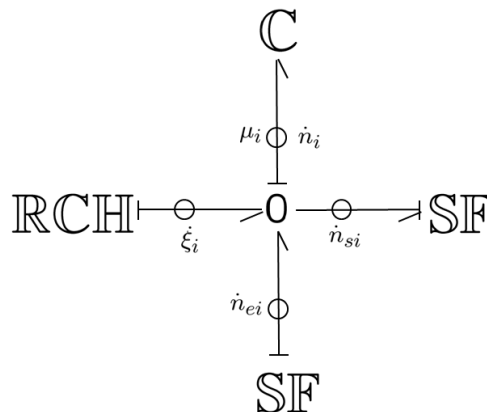


FIG. 2.27 – Modèle bond graph général d'un réacteur homogène en domaine chimique

Ainsi, pour la jonction 0, Fig 2.27, elle est l'ensemble des jonctions 0 qui représentent l'uniformité des potentiel chimique μ_i et les bilans d'espèces, dont la forme est donnée par

l'équation d'un constituant particulier i :

$$\frac{dn_i}{dt} = \dot{n}_{ei} - \dot{n}_{si} + \sum_{j=k} (\nu_{j,i}^r - \nu_{j,i}^f) J_j \text{ avec } i = 1, \dots, m \quad (2.36)$$

Ainsi, à travers la présentation de ce type de réacteur : réacteur à paramètres localisés (réacteur continu, fermés ou semi fermé...), on va exposer la procédure de modélisation et de concevoir ainsi des classes de modèles bond graph génériques dédiés aux réacteurs homogènes à paramètres localisés. Ces modèles seront adaptés à des applications liées à la commande, l'analyse structurelle et la supervision des procédés industriels chimiques, la surveillance des réactions chimiques pour la détection des réactions secondaires. Donc, on s'intéresse dans ce qui suit à la modélisation des réacteurs homogènes.

2.4.4 Cas particulier: Réacteur Continu Parfaitement Agité (CSTR)

Dans cette partie, on va exposer la procédure de modélisation des réacteurs continus et représenter en particulier : les différents sous modèles bond graph de chaque domaine énergétique (hydraulique, thermique, chimique), ainsi que les éléments bond graph correspondant à chacun, qu'ils soient des éléments résistifs, capacitifs ou autres.

Dans ce mode de fonctionnement le réacteur travaille en continu, c'est-à-dire qu'il est alimenté par les réactifs, et que les produits de la réaction sont soutirés de manière parallèle, Fig. 2.28.

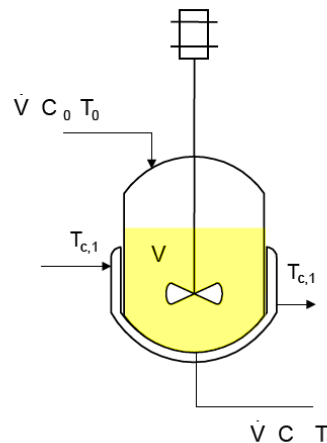


FIG. 2.28 – Schéma de principe d'un réacteur continu

2.4.4.1 Bilan de chaleur

Production de chaleur par une réaction : La maîtrise de la température d'une installation nécessite un contrôle du bilan thermique de celle-ci. Le bilan thermique peut être défini

comme étant la quantité de chaleur produite diminuée de la quantité de chaleur évacuée, qui est égale à la quantité de chaleur accumulée au sein de la masse réactionnelle ce qui entraîne l'élévation de température du milieu.

La production de chaleur, ou la puissance thermique d'une réaction chimique (\dot{Q}_r), est proportionnelle au volume du milieu réactionnel, V , à l'enthalpie de la réaction ΔH_r , et à la vitesse de réaction, r_r , la production de chaleur croit donc de manière exponentielle avec la température. On a, dans le cas d'un milieu parfaitement homogène:

$$\dot{Q}_r = \frac{dq_r}{dt} = r_r (-\Delta H_r) V \quad (2.37)$$

Elimination de chaleur par le système de refroidissement : L'évacuation de chaleur du fait des échanges thermiques avec le milieu extérieur est quant à elle proportionnelle au gradient de température établi entre le milieu réactionnel et le système de refroidissement, $T_r - T_C$, à la surface d'échange de chaleur, A , ainsi qu'au coefficient global de transfert de chaleur, U .

L'élimination de la chaleur par le système de refroidissement, proportionnelle à la différence de température entre la double enveloppe (caloporteur) et le milieu réactionnel, suit la loi suivante :

$$\dot{Q}_C = \frac{dq_C}{dt} = UA(T_r - T_C) \quad (2.38)$$

Lorsque la **puissance du système de refroidissement** est inférieure à celle de la réaction, la température augmente. Cette augmentation de la température provoque une accélération de la réaction, qui à son tour, augmente la **puissance thermique de la réaction** \dot{Q}_r . Comme cette dernière augmente exponentiellement avec la température, alors que la puissance de refroidissement n'augmente que linéairement, la capacité de refroidissement reste insuffisante et la température augmente. C'est l'emballement de la réaction ou l'explosion thermique.

Accumulation de chaleur par le milieu réactionnel : Dans ce cas, il se produit une accumulation de chaleur qui se traduit par une élévation de température du milieu.

Lorsque la puissance du système de refroidissement est inférieure à celle de la réaction, il se produit, au sein d'un milieu parfaitement homogène, une accumulation de chaleur qui se traduit par une élévation de température du milieu et le bilan thermique global peut s'écrire sous la forme :

$$\dot{Q}_{ac} = \sum_{i=1}^p \dot{V}_{ei} \rho_i C_{pi} T_{ei} - \dot{V}_s \rho_r C_{pr} T_r + \dot{Q}_r + \dot{Q}_C + \dot{Q}_{fperte} + \dot{Q}_{insertion} + \dot{Q}_{dos} \quad (2.39)$$

Les différents termes de l'équation sont explicités ci-dessous :

$\dot{Q}_{ac} = m_r C_{pr} \frac{dT_r}{dt}$: Puissance accumulée dans la masse réactionnelle,

\dot{Q}_r : Puissance thermique instantanée dégagée par la réaction,

$\dot{Q}_C = \frac{dq_C}{dt} = UA(T_r - T_C)$: Puissance mise en œuvre lors du transfert avec la double enveloppe (caloporteur), ou UA représente le coefficient global d'échange de chaleur.

$\dot{Q}_{fperte} = \alpha_{co}(T_{ext} - T_r)$: Puissance thermique perdue par les parois (couvercle). (Généralement la paroi est adiabatique),

$\dot{Q}_{insertion} = m_i C_{pi} \frac{dT_r}{dt}$: Puissance accumulée par les éléments plongeant dans le milieu (agitateur, sonde etc..),

$\dot{Q}_{dos} = m_{dos} C_{pdos} (T_{dos} - T_r)$: Puissance thermique due au réactif ajouté (résultant de la différence de température entre l'alimentation et le milieu réactionnel).

Dans la plupart des cas et si on néglige les puissances \dot{Q}_{fperte} , $\dot{Q}_{insertion}$ et \dot{Q}_{dos} , l'équation précédente aura cette forme:

$$\dot{Q}_{ac} = \sum_{i=1}^p \dot{V}_{ei} \rho_i C_{pi} T_{ei} - \dot{V}_s \rho_r C_{pr} T_r + \dot{Q}_r + \dot{Q}_C \quad (2.40)$$

D'une part, l'accumulation se traduit comme étant la variation du contenu énergétique d'une masse réactionnelle en raison des variations de la température.

De façon formelle, l'accumulation doit tenir compte de la capacité calorifique du réacteur et de ses composants, tout du moins de la partie en contact thermique direct avec le milieu réactionnel.

Remarque : *Pour des réacteurs du type cuve agitée, la capacité calorifique de l'appareillage est la plupart du temps négligeable devant celle de la masse réactionnelle.*

D'autre part, l'une de propriété du réacteur continu est la stationnarité après sa phase de démarrage, c.-à-d. que la température ainsi que les concentrations des composants du milieu ne changent pas avec le temps. Alors, le bilan thermique simplifié est :

$$0 = \sum_{i=1}^p \dot{V}_{ei} \rho_i C_{pi} T_{ei} - \dot{V}_s \rho_r C_{pr} T_r + \dot{Q}_r + \dot{Q}_C \quad (2.41)$$

Le contrôle de la température consistera à éviter une accumulation trop importante de chaleur par le milieu. Le bilan thermique résulte d'un modèle simplifié qui suppose un comportement parfaitement homogène du milieu, la température et la composition étant supposées uniformes. Dans certains cas rencontrés dans l'industrie, ce bilan peut être beaucoup plus complexe, particulièrement lorsque le système réactionnel adopte un comportement hétérogène lié, par exemple, à l'apparition de réactions rapides, initiées par une source d'amorçage locale (point chaud, impureté, surconcentration localisée...).

Ainsi, l'équation du bilan thermique peut se mettre sous la forme d'une jonction 0 dans le modèle pseudo bond graph défini par la Fig.2.29.

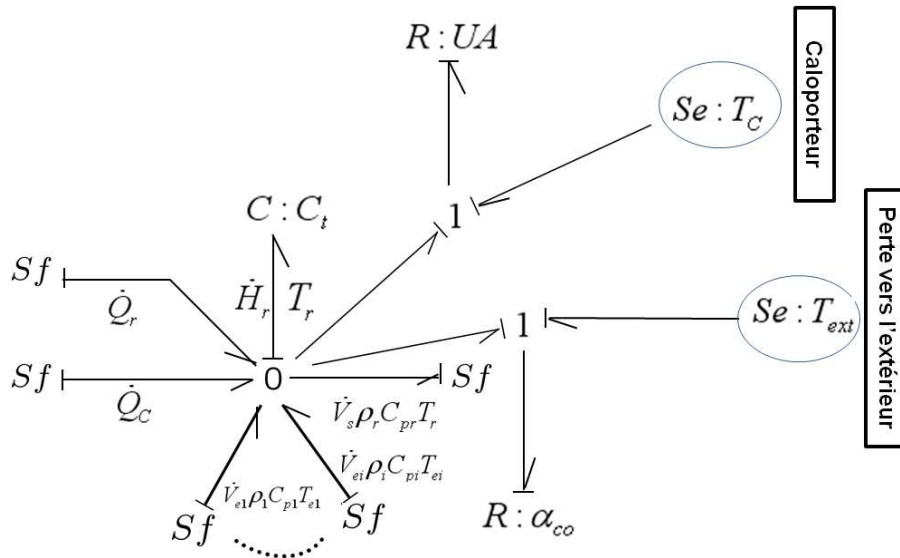


FIG. 2.29 – Modèle pseudo bond graph d'un réacteur homogène continu en domaine thermique.

2.4.4.2 Bilan de masse

Pour le modèle bond graph du bilan de masse, sa forme va dépendre principalement de la phase du mélange réactif et du mode de fonctionnement du réacteur.

On considère, de plus, que \dot{m}_{ei} est la masse des éléments plongeant effectivement dans le milieu réactionnel et qu'ils sont à la température T_{ei} .

Le bilan massique vient compléter les informations manquantes sur le contenu du réacteur. Alors, les débits massiques peuvent être réécrits en fonction des débits volumiques d'entrée et de sortie :

$$\dot{m} = \frac{dm}{dt} = \sum \dot{m}_{ei} - \dot{m}_s = \sum V_{ei} \rho_i - \dot{V}_s \rho_r \quad (2.42)$$

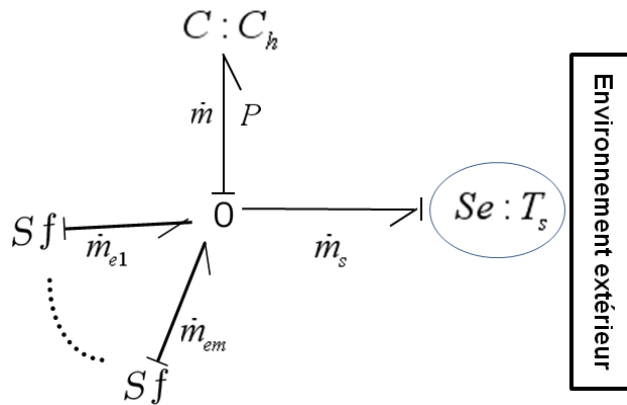


FIG. 2.30 – Modèle pseudo bond graph générique d'un réacteur homogène continu en domaine hydraulique.

Les deux capacités C_h et C_t sont évidemment couplées : les deux variables d'état, masse totale et enthalpie totale, sont dépendantes.

2.4.5 Echangeur de chaleur

Un échangeur de chaleur est un dispositif permettant de transférer de l'énergie thermique d'un fluide vers un autre, sans les mélanger. Le flux thermique traverse la surface d'échange qui sépare les fluides. Un fluide circulant au travers d'une résistance, la puissance thermique est conservée sous forme d'un flux d'enthalpie.

Dans un échangeur de chaleur, ce fluide reçoit à travers une paroi une puissance thermique qui représente le flux transféré par conduction \dot{Q} . on propose de modéliser les phénomènes d'échanges de chaleur par un élément résistif R .

Les phénomènes d'échange de chaleur entre deux fluides à travers une paroi métallique (Fig 2.31) sont modélisés par les éléments R . $R : R_{cf}$ et R_{pf} représentent les résistances thermiques (inverse du coefficient d'échange de chaleur) de la partie chaude vers les parois, et des parois vers la partie froide respectivement.

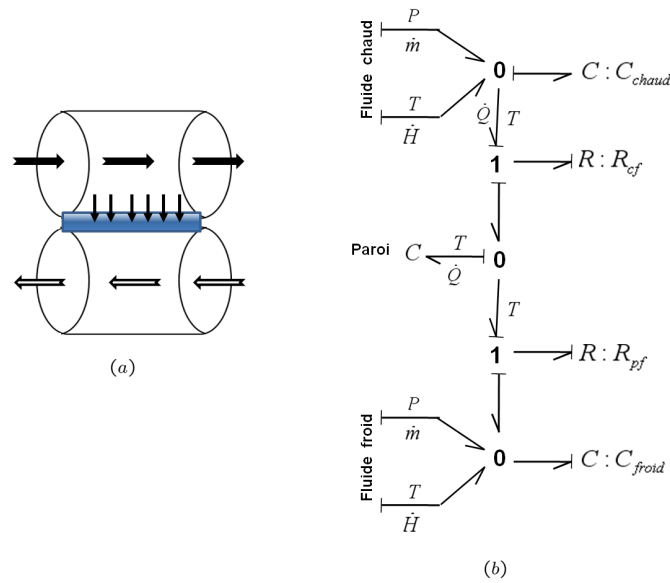


FIG. 2.31 – Modèle Bond Graph de l'échangeur de chaleur (a) schéma de principe (b) Modélisation

2.5 Modèles Bond Graph incertains des composants et phénomènes chimiques

La simulation des systèmes physico-chimiques complexes repose sur un ensemble d'équations phénoménologiques, dont les paramètres (vitesses de réaction, constantes de diffusion, coefficient d'échange de chaleur...) sont extraits d'analyse de sous-systèmes, que ce soit par des méthodes expérimentales, ou bien par des calculs théoriques. Dans tous les cas, des incertitudes sont associées à ces paramètres, et il est légitime de s'inquiéter de leur effet sur les prédictions des modèles, notamment dans le cas de modèles non-linéaires comme les systèmes d'équations chimiques couplées. Très peu de travaux sont consacrés à cette problématique en chimie-physique.

La description des incertitudes sur les paramètres physico-chimiques conditionne la fiabilité de l'analyse de sensibilité des indicateurs de faute et la gestion des alarmes. Le manque d'informations sur les incertitudes associées aux paramètres cinétiques est un handicap sérieux. Notre travail sur la représentation sous forme des transformations linéaires fractionnaires (LFT), visant à remédier en partie à ce problème, est désormais pris en compte dans la définition du modèle cinétique et thermodynamique d'une réaction chimique de synthèse.

Le présent travail est une continuité de la recherche menée au sein du LAGIS *M.A. Djéziri* (2007) [137], et s'intéresse à la surveillance robuste des processus industriels décrits par des modèles Bond Graph incertains sous forme LFT. Ainsi, nous développons ces modèles

incertains pour assurer : (i) la fidélité de représentation des incertitudes pour le passage des paramètres d'une échelle à l'autre ; (ii) la propagation la plus précise possible des incertitudes sur ces paramètres aux prédictions du modèle ; et (iii) des analyses de sensibilité du système de surveillance. Notre contribution consiste alors à exploiter les propriétés causales, structurelles et fonctionnelles d'un bond graph LFT couplé pour développer une procédure de génération automatique des indicateurs de fautes robustes aux incertitudes paramétriques. Concrètement, il s'agit de mettre en place une méthode de surveillance à base d'un modèle Bond Graph incertain sous forme LFT pour la détection et la localisation de défauts. Ainsi, les RRAs générées seront composée d'une partie déterministe et d'une partie incertaine. Cette partie incertaine permettra de fixer un seuil robuste capable de distinguer et limiter les fausses alarmes.

La première partie de ce travail développe des modèles des éléments bond graph à paramètre incertain, capable de présenter correctement les différents phénomènes (dissipation d'énergie, accumulation d'énergie, transformation chimique. . .) liés à des réactions chimiques. Nous modélisons des éléments et des multiports de stockage et de dissipation (\mathbb{C} et \mathbb{R}). Dans la deuxième partie de ce chapitre, après une brève description du système réactif étudié, un modèle Bond Graph à paramètres incertains sous forme LFT d'une réaction exothermique, ayant lieu dans le réacteur continu adiabatique parfaitement agité, est développé.

2.5.1 Modélisation LFT des éléments Bond Graph

2.5.1.1 Représentation des systèmes incertains sous forme LFT

La transformation linéaire fractionnaire (*en anglais Linear Fractional Transformation LFT*) permet de représenter tout modèle pour lequel les paramètres incertains interviennent sous forme de fractions rationnelles.

Dans ce formalisme, la modélisation de l'écart dynamique entre le système et son modèle nominal est basée sur la notion de feed-back. La famille de modèles peut alors se représenter comme le modèle nominal bouclé par des incertitudes de modèle. Ces incertitudes de modèle se décomposent habituellement en deux catégories. Les incertitudes non structurées, pour lesquelles on ne connaît qu'une borne supérieure dans le domaine fréquentiel et les incertitudes structurées qui modélisent principalement les incertitudes sur les paramètres du modèle nominal. Le formalisme LFT permet d'exprimer le système incertain comme une LFT d'une matrice M bouclée sur un bloc d'incertitude Δ (Fig. 2.32). Ce bloc d'incertitude pourra être soit une matrice quelconque dans le cas d'une approche non structurée, soit une matrice diagonale par bloc dans le cas d'une approche structurée. Cette matrice est construite à l'aide de blocs diagonaux traduisant une ou plusieurs incertitudes.

Dans le cas linéaire, cette forme standard mène à une représentation d'état de la forme

$$\begin{cases} w = -\Delta z \\ \dot{x} = Ax + B_1 w + B_2 u \\ z = C_1 x + D_{11} w + D_{12} u \\ y = C_2 x + D_{21} w + D_{22} u \end{cases} \quad (2.43)$$

avec $x \in \mathbb{R}^n$ le vecteur d'état du système, $u \in \mathbb{R}^m$ le vecteur regroupant les entrées de commande du système, $y \in \mathbb{R}^p$ le vecteur regroupant les sorties mesurées du système. $w \in \mathbb{R}^l$ et $z \in \mathbb{R}^l$ regroupent respectivement les entrées et les sorties auxiliaires. n , m , l et p sont des entiers positifs.

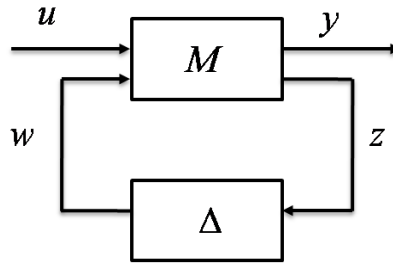


FIG. 2.32 – Représentation LFT

Les travaux de *D. Henry & al. (2001)* [114] et *D. Henry & al. (2006)* [138], ont permis d'établir des résultats importants en analyse et en synthèse pour différents types d'incertitudes qui peuvent être prises en compte par le formalisme LFT. Cette forme de représentation est très utilisée pour la synthèse des lois de commande des systèmes incertains utilisant le principe de la μ -analyse. Elle consiste à séparer la partie nominale d'un modèle de sa partie incertaine *D. Alazard & al (1999)* [139].

2.5.1.2 Modélisation des éléments BG incertains

Dans les travaux de *C. Sié Kam & al. (2005)* [117] et (2001) [140], deux méthodes de la modélisation des incertitudes paramétriques par bond graph sont proposées. La première consiste à représenter l'incertitude sur un élément bond graph comme un autre élément de même type, causalement lié à l'élément nominal ou au reste du modèle. Ces incertitudes sont gardées en causalité dérivée lorsque le modèle est en causalité intégrale préférentielle pour ne pas modifier l'ordre du modèle. La deuxième méthode est la forme des transformations linéaires fractionnelles (LFT) introduite sur des modèles mathématiques par *R. Redheffer*

(1960) [141]. Cette forme de modélisation offre plusieurs avantages d'un point de vue diagnostic des systèmes incertains et permet de modéliser toutes les incertitudes pour développer une approche de diagnostic robuste. La modélisation des systèmes linéaires à paramètre incertains a été développée dans *C. Sié Kam & al. (2001)* [140]. Ensuite, *M. A. Djeziri & al. (2009)* [21] aborde le diagnostic des BG-LFT monoénergie avec des applications électromécaniques [137].

Sur un modèle bond graph, chaque élément correspond à un composant matériel ou un phénomène physique bien précis, facilitant ainsi l'identification des valeurs numériques des paramètres et des incertitudes, puis le passage à la forme LFT se fait par un simple ajout de sources modulées d'effort et de flux sur le modèle. Les variables d'état sur un modèle bond graph sont liées aux éléments dynamiques I et C, et l'aspect causal et structurel du modèle permet la génération automatique d'un modèle d'état incertain sous la forme standard (2.43) directement à partir du bond graph.

La mise sous forme LFT exige que le modèle soit propre et observable. La méthodologie bond graph permet par des manipulations causales de vérifier ces propriétés directement sur le modèle bond graph *C. Sueur & al. (1989)* [142].

2.5.1.3 Effet de type d'incertitudes

Les formes additives (directes ou inverses) sont particulièrement bien adaptées pour la modélisation des non linéarités présentes dans le système. Tandis que les formes multiplicatives (directes ou inverses) en entrée sont bien adaptées pour prendre en compte les erreurs de modélisation concernant les actionneurs ainsi que les dynamiques négligées. Les formes multiplicatives (directes ou inverses) en sortie sont quant à elles, utilisées pour tenir compte des erreurs de modélisations liées aux capteurs.

La modélisation d'incertitudes complexes est assez souvent rencontrée dans la pratique, le cas le plus naturel où elles apparaissent est la prise en compte des dynamiques non modélisées ou négligées, typiquement des dynamiques hautes fréquences. Ce type d'incertitudes de modèle est dit aussi incertitudes non structurées, au sens où la seule information dont on dispose pour caractériser ce type d'incertitudes est une borne sur la norme de sa réponse fréquentielle.

Le traitement d'incertitudes complexes est complètement différent de celui d'incertitudes réelles pour deux raisons. La normalisation est d'abord effectuée par rapport à des fonctions de pondération, qui dépendent de la fréquence. D'autre part, le problème de minimalité d'une forme standard ne se pose pas, car les incertitudes complexes sont normalement bien localisées et non répétées dans le schéma bloc LFT, contrairement aux incertitudes paramétriques qui apparaissent souvent à différents lieux dans différentes équations différentielles.

De point de vue bond graph, en introduisant une incertitude de façon additive sur les éléments R , C et I en causalité intégrale ou dérivée, les travaux de *C. Sié Kam & al. (2005)*

[117] M. A. Djeziri & al. (2009) [21] montrent que l'incertitude représentée par un élément bond graph (ΔR , ΔC et ΔI) est causalement liée au paramètre nominal (R_n , C_n et I_n) et n'a aucun lien causal avec le reste du modèle. Cette situation donne lieu à une boucle différentielle (traits interrompus) entre l'élément nominal et l'incertitude. Ainsi, sur des modèles complexes, où le nombre d'incertitudes paramétriques est important, la simulation de la dynamique du modèle devient pratiquement impossible à cause des boucles algébrodifférentielles (Fig. 2.33 et 2.34). Ce problème reste donc présent quelle que soit la causalité adoptée pour développer le schéma de diagnostic.

Contrairement à l'effort introduit par une incertitude additive par rapport au paramètre, l'effort apporté par une incertitude multiplicative est une fonction de l'effort apporté par le paramètre nominal. Pour illustrer cette particularité, introduisons une incertitude de façon multiplicative sur l'élément I en causalité dérivée préférentielle, figure 2.34, donne

$$e_I = I_n(1 + \delta_I) \frac{df_I}{dt} = I_n \frac{df_I}{dt} + \delta_I I_n \frac{df_I}{dt} = e_n + \delta_I e_n = e_n + e_{inc} \quad (2.44)$$

avec I_n la valeur nominale de l'élément I et $\delta_I = \frac{\Delta I}{I_n}$ l'incertitude multiplicative sur le paramètre, et ΔI l'incertitude additive sur le paramètre. $e_n = I_n \frac{df_I}{dt}$ et $e_{inc} = \delta_I I_n \frac{df_I}{dt}$ sont respectivement l'effort et le flux dans le paramètre I représentent respectivement l'effort apporté par le paramètre nominal et l'effort introduit par l'incertitude multiplicative.

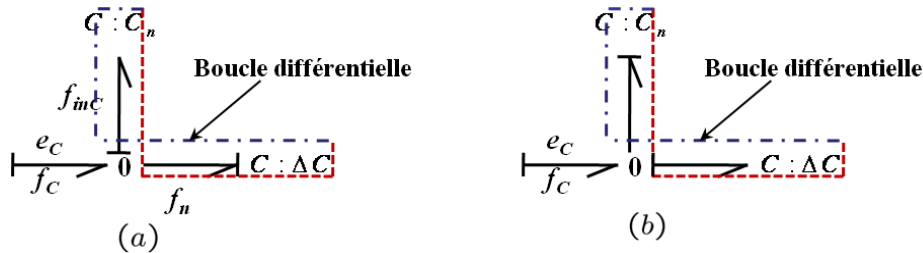


FIG. 2.33 – (a) Élément C en causalité intégrale avec incertitude additive. (b) Élément C en causalité dérivée avec incertitude additive.

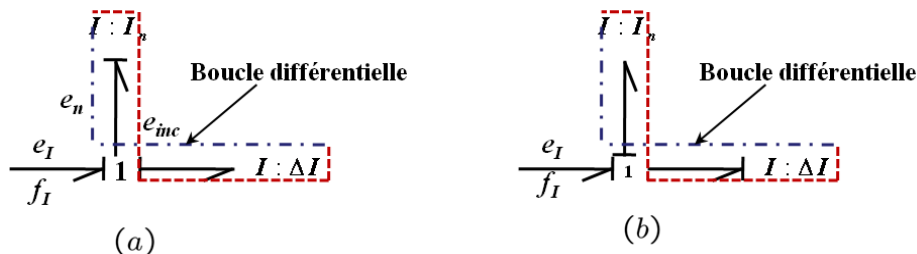


FIG. 2.34 – (a) Élément I en causalité intégrale avec incertitude additive. (b) Élément I en causalité dérivée avec incertitude additive.

2.5.1.4 Construction d'un modèle BG-LFT

La méthode consiste à remplacer chacun des éléments incertains par son BG-LFT. Le BG-LFT complet peut alors se représenté par le schéma de la Fig. 2.35, où apparaît la structure standard de la représentation LFT.

L'avantage de l'approche BG-LFT par rapport à une approche d'état LFT se résume dans deux points : la complexité dans la construction du modèle et la structuration des incertitudes sur le modèle. En effet, en présence d'éléments inductifs ou inertiels (I) sur le système, la construction d'un modèle d'état linéaire ou non linéaire sous forme LFT devient difficile.

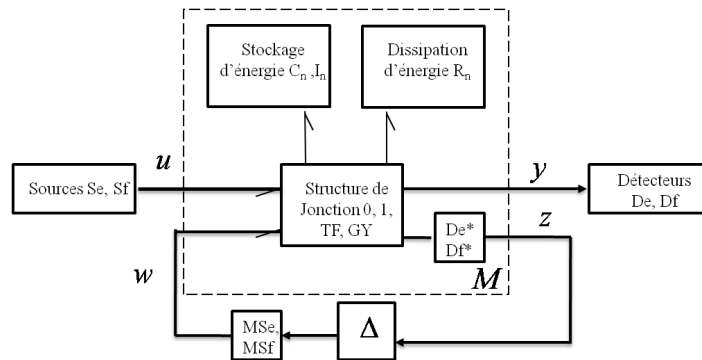


FIG. 2.35 – Représentation d'un BG-LFT

Dans le cas linéaire et en présence d'éléments inductifs ou inertiels (I), les paramètres a (i, j) et b (i, j) des matrices d'état et de commande A et B sont une combinaison entre les éléments résistifs et capacitifs (R et C) et les éléments inductifs ou inertiels (I). Le passage à la forme LFT n'est pas toujours possible et dépend du choix des variables d'état. Sur les modèles d'état non linéaires la séparation de la partie nominale du modèle de sa partie incertaine devient encore plus difficile, voire impossible.

2.5.1.5 Exemple pédagogique: système hydraulique

Considérons un exemple pédagogique représentant un système hydraulique donné par sa représentation symbolique sur le schéma 2.36 (a) et son modèle bond graph déterministe global correspondant en causalité intégrale préférentielle (schéma 2.36 (b)) afin d'illustrer la méthodologie de modélisation BG-LFT. Dans cet exemple, on distingue deux détecteurs : P_m un détecteur d'effort (De) permettant la mesure de la pression (liée à la masse stockée dans le réservoir), \dot{m}_m un détecteur de flux (Df) mesurant le débit au niveau de la vanne. La pompe délivre un flux de masse Sf . Se est une source de pression (qui peut être atmosphérique). Les capteurs sont supposés être idéaux et sont modélisés par des liens d'information indiquant qu'aucune puissance n'est échangée avec le système physique.

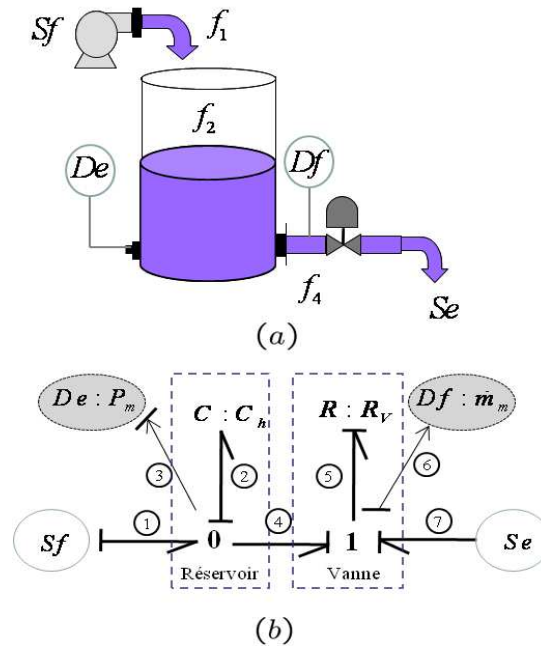


FIG. 2.36 – (a) Exemple pédagogique : système hydraulique. (b) Modèle BG déterministe en causalité intégrale.

La pression et le débit massique sont respectivement les variables d'effort et de flux. R et C désignent respectivement la résistance hydraulique introduite par la vanne et la capacité hydraulique du réservoir. En effet, l'élément bond graph C_h stocke l'énergie hydraulique (due à la masse du liquide) et son expression est donnée par la relation suivante:

$$C_h = A/g$$

avec A la section du réservoir et g la constante de gravité.

La vanne de sortie est modélisée par l'élément résistif $R : R_V$ (représentant une perte de charge hydraulique) modulé par le signal de commande x . Le flux molaire donné par ce dernier est comme suit :

$$f = C_d(x) \operatorname{sign}(\Delta P) \sqrt{|\Delta P|}$$

avec ΔP est la différence de pression à travers la vanne, x est la position de tige de la vanne, C_d est une fonction représentant le coefficient de décharge qui dépend de type de vanne (linéaire, quadratique, .. etc.), et sign est une fonction d'ajustement de la direction du flux.

Le modèle bond graph incertain sous forme LFT est obtenu en remplaçant chaque élément incertain par son modèle BG-LFT; on obtient alors le modèle BG-LFT de la fig. 2.37. Ce modèle est construit plus facilement qu'un modèle d'état et représente fidèlement le système réel. Les incertitudes paramétriques $\delta_{1/R}$ et $\delta_{1/C}$ correspondent à des composants matériels bien précis. Les interactions entre les efforts (ou les flux) introduits par les paramètres nominaux

et les incertitudes sont assurées par les contraintes causales et structurelles du modèle; les efforts (ou les flux) se propagent en suivant des chemins causaux et s'ajoutent au niveau d'une jonction 1 (ou d'une jonction 0).

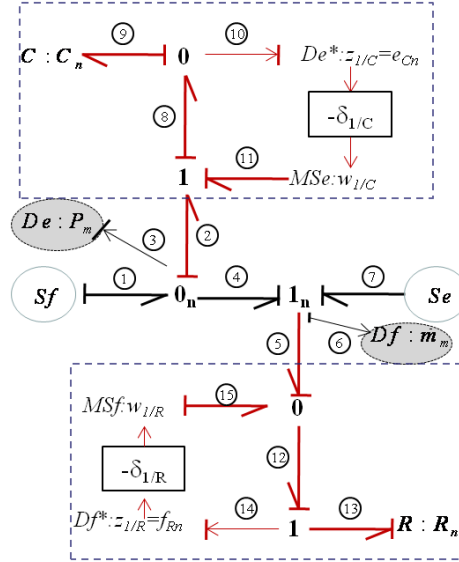


FIG. 2.37 – Modèle BG-LFT en causalité intégrale du système hydraulique.

Un modèle d'état LFT peut être obtenu facilement en utilisant les bonds graphs. Les variables d'état sont liées aux éléments dynamiques sur le modèle, puis le modèle d'état est construit en utilisant les contraintes de structure sur les jonctions et les lois de comportement sur les éléments bond graphs. Calculons le modèle d'état du circuit hydraulique à partir du modèle bond graph LFT de la fig. 2.37. La variable d'état est q_C (la charge dans la capacité C), le vecteur d'état et sa dérivée s'écrivent :

$$x = \int f_2 dt = q_C \quad ; \quad \dot{x} = f_2 = \dot{q}_C$$

- Lois de structure

Jonction 0_n :

$$\begin{cases} e_9 = e_2 = e_4 = e_5 \\ f_2 = q_C = Sf - f_4 \end{cases} \quad (2.45)$$

Jonction 1_n :

$$\begin{cases} f_4 = f_5 = f_7 \\ e_5 = e_4 + e_7 \end{cases} \quad (2.46)$$

avec $e_4 = \frac{1}{C_n} \int f_2 dt - w_{1/C}$

$$e_7 = Se$$

$$e_5 = e_{13} - e_{15}$$

$$e_{13} = \frac{1}{C_n} \int f_2 dt - w_{1/C} + Se$$

$$e_{15} = w_{1/R}$$

$$\text{alors, } \dot{q}_C = Sf - \frac{1}{R_n C_n} q_C + \frac{w_{1/C}}{R_n} - \frac{Se}{R_n} + \frac{1}{R_n} w_{1/R}$$

$z_{1/C}$ et $z_{1/R}$ sont les sorties fictives calculées à partir du modèle bond graph de la fig. 2.37:

$$z = \begin{bmatrix} z_{1/C} \\ z_{1/R} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} e_{Cn} \\ f_{Rn} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} e_9 \\ f_{13} \end{bmatrix} \quad (2.47)$$

$$\text{avec } e_9 = \frac{1}{C_n} q_C$$

$$f_{13} = \frac{e_{13}}{R_n}$$

Ainsi, à partir des équations (2.45), (2.46) et (2.47) le modèle d'état est donné sous la forme (2.48), qui correspond à la forme standard de l'équation (2.43)

$$\left\{ \begin{array}{l} \dot{x} = \dot{q}_C = -\frac{1}{C_n R_n} q_C + \left(1 \quad -\frac{1}{R_n} \right) \begin{bmatrix} Sf(t) \\ Se(t) \end{bmatrix} + \left(\frac{1}{R_n} \quad \frac{1}{R_n} \right) \begin{bmatrix} w_{1/C} \\ w_{1/R} \end{bmatrix} \\ z = \begin{bmatrix} z_{1/C} \\ z_{1/R} \end{bmatrix} = \frac{1}{C_n R_n} q_C + \left(\frac{-1}{R_n} \quad \frac{-1}{R_n} \right) \begin{bmatrix} w_{1/C} \\ w_{1/R} \end{bmatrix} + \left(0 \quad \frac{1}{R_n} \right) \begin{bmatrix} Sf(t) \\ Se(t) \end{bmatrix} \\ w = \begin{bmatrix} w_{1/C} \\ w_{1/R} \end{bmatrix} = \begin{pmatrix} -\delta_{1/C} & 0 \\ 0 & -\delta_{1/R} \end{pmatrix} \begin{bmatrix} z_{1/C} \\ z_{1/R} \end{bmatrix} \end{array} \right. \quad (2.48)$$

2.5.2 Présence d'incertitude dans les systèmes chimiques

La modélisation des systèmes physiques fait toujours appel à un compromis entre la réalité physique et l'abstraction des éléments de ces derniers.

Parmi les causes qui conduisent à s'intéresser aux erreurs de modèles en génie de procédés, on peut citer :

- **Sources de complexité des modèles en génie de procédés** : Contrairement aux systèmes électriques ou mécaniques, les systèmes rencontrés en génie des procédés mettent en œuvre des lois complexes en raison du couplage des différents phénomènes (thermique, hydraulique, mécanique et chimique) non stationnaires. Le nombre de variables pour décrire ce type de procédé est supérieur ou égal à deux.

- **Problème de calcul des paramètres** : La capacité spécifique et la constante de vitesse de la réaction sont les paramètres les plus difficiles à identifier avec précision, surtout pour

les réactions exothermiques, alors qu'ils jouent généralement des rôles importants dans la surveillance et le diagnostic d'un milieu réactionnel. Ces paramètres peuvent varier avec la température. La constante de vitesse subit a priori des variations dues à la température moins importantes, car l'énergie d'activation est généralement proche de la valeur réel. Par contre, l'effet de capacité spécifique ou l'enthalpie spécifique est plus important dans un milieu réactionnel, car ce paramètre est lié directement à la température.

Par exemple, dans le cas d'un régime sous saturé, l'enthalpie spécifique " $h = C_p \cdot T$ " est considérée indépendante de la pression. Toutefois, elle varie faiblement pour une température inférieure à 100 C°.

La capacité thermique C_p est un paramètre qui dépend de la nature du fluide. Il varie en fonction de la température ($C_p = [C_{pmin}, C_{pmax}]$). Il est aisé, une fois la plage de la variation de la température de fonctionnement connue, de fixer les limites supérieurs et inférieures.

En régime saturé, lorsque la vapeur est humide, les températures, pressions et enthalpies spécifiques ne sont plus indépendantes. Une solution à ce problème réside dans la détermination des polynômes représentant les fonctions thermodynamiques de ces variables.

Les paramètres d'une réaction chimique d'un système en génie des procédés, ainsi que leur précision, ne sont pas tous donnés par le constructeur. La capacité spécifique est déterminé expérimentalement sous forme d'intervalle $[C_{dMin}, C_{dMax}]$.

- **Evaluation des incertitudes des paramètres des modèles est difficile**: Les incertitudes sur les paramètres induisent donc des erreurs sur le déroulement de la réaction et sur le flux de production avec les conséquences suivantes :

- la réponse des grandeurs régulées (température du milieu réactionnel, flux de la chaleur,) est dégradée.

- le système peut devenir thermiquement instable quand l'erreur d'estimation des paramètres devient trop importante ;

- un produit supplémentaire est apparu ce qui modifier/ influe sur le déroulement normal du système réactif.

Afin de pouvoir étudier analytiquement la sensibilité paramétrique des résidus vis à vis des différentes stratégies de surveillance tout en limitant la complexité des équations à manipuler, l'analyse théorique de la sensibilité sera basée sur les équations déduites du modèle Bond graph.

2.5.3 Construction d'un modèle BG-LFT des éléments d'une réaction chimique

La modélisation thermochimique d'une structure complexe est généralement soumise à deux types d'incertitude. Le premier type correspond aux incertitudes sur les valeurs des paramètres qui définissent le modèle, qu'il s'agisse des caractéristiques thermochimiques des

constituants (l'énergie d'activation, le facteur pré-exponentiel, l'enthalpie de la réaction...) ou encore des forces ou des déplacements imposés comme conditions aux limites. Elles proviennent d'une méconnaissance du problème considéré. Le second type regroupe l'ensemble des erreurs de modélisation (inhérentes au modèle). Toutes ces incertitudes ont pour conséquence une incertitude sur la réponse qu'il est essentiel de quantifier (le produit final).

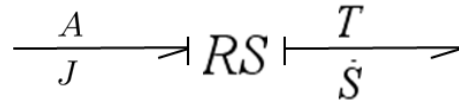


FIG. 2.38 – Modèle de dissipation de l'énergie dans une réaction chimique

2.5.3.1 Modèle BG-LFT d'élément R simple

La détermination des valeurs des paramètres cinétiques (l'énergie d'activation E , la constance de vitesse k_0 , la vitesse cinétique...) dans une réaction chimique est difficile. Ces paramètres incertains sont présentés par des marges d'incertitude sous forme des intervalles. Prenons l'exemple de la vitesse de la réaction globale J , la valeur varie entre un minimum J_{min} et un maximum J_{max} . Alors la dissipation de l'énergie, figure 2.38, doit être modélisée par un élément résistif incertain, qui varie entre R_{min} et R_{max} .

L'introduction d'une incertitude de façon multiplicative sur l'élément R en causalité résistance donne:

$$\begin{aligned} e_R &= R_n (1 + \delta_R) f_R & (2.49) \\ &= R_n f_R + \delta_R R_n f_R \\ &= e_n + e_{inc} \end{aligned}$$

avec R_n la valeur nominale de l'élément R et δ_R l'incertitude multiplicative sur le paramètre. e_R et f_R sont respectivement l'effort et le flux dans l'élément incertain R . e_n et e_{inc} sont respectivement l'effort apporté par le paramètre nominal et l'effort introduit par l'incertitude multiplicative.

L'introduction d'une incertitude multiplicative sur l'élément R en causalité conductance donne:

$$\begin{aligned} f_R &= \frac{1}{R_n} \left(1 + \delta_{\frac{1}{R}}\right) e_R & (2.50) \\ &= \frac{1}{R_n} e_R + \delta_{\frac{1}{R}} \frac{1}{R_n} e_R \\ &= f_n + \delta_{\frac{1}{R}} f_n = f_n + f_{inc} \end{aligned}$$

avec $\delta_{\frac{1}{R}} = \frac{-\Delta R}{R_n + \Delta R}$ l'incertitude multiplicative sur l'élément R en causalité conductance. e_R et f_R sont respectivement l'effort et le flux dans l'élément R en causalité conductance. f_n et

f_{inc} représentent respectivement le flux apporté par le paramètre nominal et le flux introduit par l'incertitude multiplicative.

Les modèles bond graphs sont donnés comme suit:

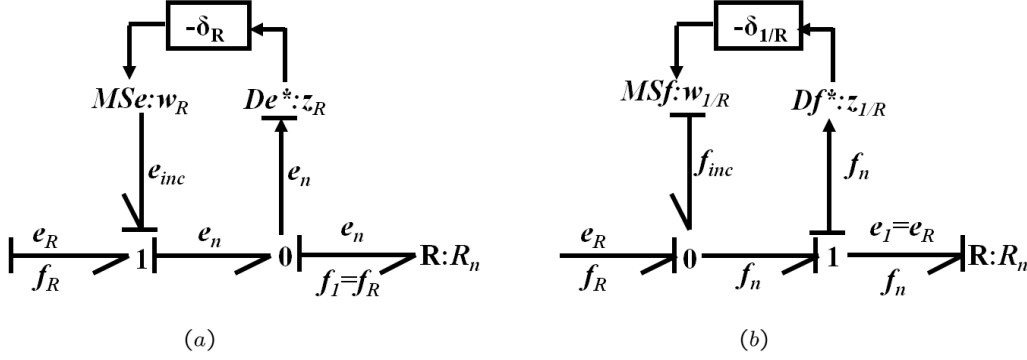


FIG. 2.39 – (a) Modèle BG-LFT d'un élément R en causalité résistance avec incertitude multiplicative. (b) Modèle BG-LFT d'un élément R en causalité conductance avec incertitude multiplicative.

2.5.3.2 Modèle BG-LFT du Multiport \mathbb{R}

Dans le cas d'une causalité simple où on connaît soit l'effort soit le flux à l'entrée du multiport, la puissance délivrée est une fonction non linéaire de la variable de puissance connue et de la valeur du paramètre \mathbb{R} permettant ainsi de prendre en considération l'incertitude sur le multiport \mathbb{R} (Fig. 2.38). Le multiport \mathbb{R} chimique correspond à titre d'exemple à la génération d'entropie dans une réaction exothermique. Le multiport \mathbb{R} est caractérisé par une relation non linéaire complexe $\Phi(\mathbb{R}, \dot{S}, J, A, T) = 0$, où \mathbb{R} étant le paramètre du modèle dépendant du type de réaction chimique. Lorsque c'est la variable effort A (affinité chimique) qui est connue à l'entrée du multiport, l'expression du flux à la sortie s'écrit:

$$\begin{aligned} \dot{S} &= \Phi(\mathbb{R}_n, A) (1 + \delta_{1/\mathbb{R}}) \\ &= \Phi(\mathbb{R}_n, A) + \delta_{1/\mathbb{R}} \Phi(\mathbb{R}_n, A) \\ &= \dot{S}_n + \dot{S}_{inc} \end{aligned} \quad (2.51)$$

où \dot{S}_{inc} et \dot{S}_n représentent respectivement, la partie incertaine et certaine de la variable de sortie (flux d'entropie \dot{S}).

Le modèle bond graph incertain sous forme LFT du multiport équivalent au modèle mathématique de l'équation (2.51) est donné par la Fig. 2.40 (a).

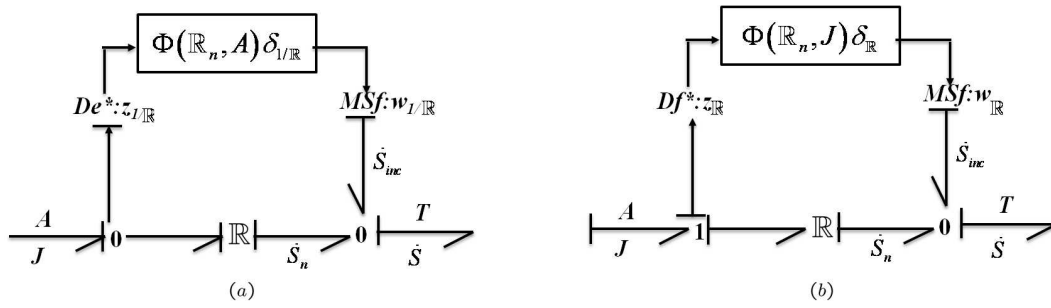


FIG. 2.40 – Multiport incertain \mathbb{R} sous forme LFT (a) en causalité résistance avec incertitude multiplicative. (b) en causalité conductance avec incertitude multiplicative

avec A l'effort connu à l'entrée du multiport \mathbb{R} .

Dans le cas où c'est la variable flux qui est connue à l'entrée du multiport \mathbb{R} , l'expression du flux à la sortie s'écrit:

$$\begin{aligned}
 \dot{S} &= \Phi(\mathbb{R}_n, J) (1 + \delta_{\mathbb{R}}) \\
 &= \Phi(\mathbb{R}_n, J) + \delta_{\mathbb{R}} \Phi(\mathbb{R}_n, J) \\
 &= \dot{S}_n + \dot{S}_{inc}
 \end{aligned} \tag{2.52}$$

avec J le flux connu à l'entrée du multiport \mathbb{R} . Le modèle bond graph incertain sous forme LFT du multiport \mathbb{R} est donné par la Fig. 2.40 (b).

2.5.3.3 Modèle BG-LFT d'élément C

Dans ce sens, les lois constitutives des éléments pseudo bond graph C s'imposent à partir beaucoup plus du côté relationnel, à titre indicatif pour les capacités chimiques.

La loi caractéristique de l'élément incertain C en causalité dérivée avec une incertitude multiplicative est donnée comme suit:

$$\begin{aligned}
 f_C &= C_n (1 + \delta_C) \frac{de_C}{dt} \\
 &= C_n \frac{de_C}{dt} + \delta_C \left(C_n \frac{de_C}{dt} \right) \\
 &= C_n \frac{de_C}{dt} - w_C = f_{Cn} + f_{Cin}
 \end{aligned} \tag{2.53}$$

avec $\delta_C = \frac{\Delta C}{C_n}$, C_n la valeur nominale de l'élément C , δ_C l'incertitude multiplicative sur le paramètre, et ΔC l'incertitude additive sur le paramètre. w_C l'entrée fictive qui représente l'incertitude sur le flux à la sortie de l'élément C . e_C et f_C sont respectivement l'effort et le flux dans l'élément incertain C .

Le modèle bond graph incertain sous forme LFT de l'élément C équivalent au modèle mathématique de l'équation (2.53) est donné par la Fig. 2.41 (a).

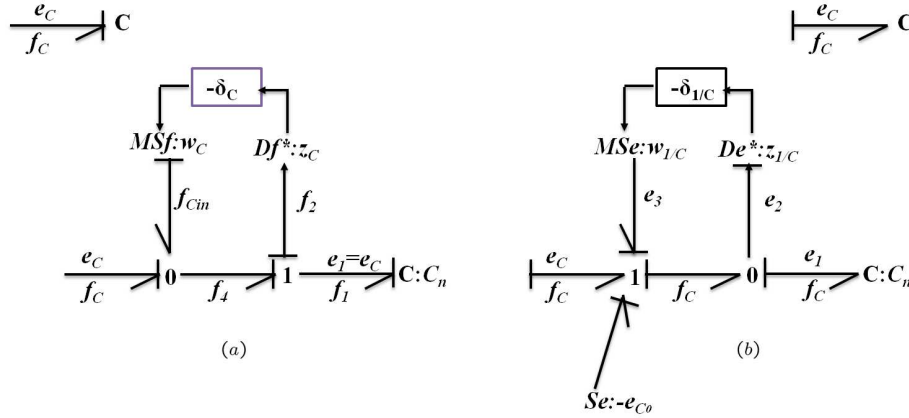


FIG. 2.41 – (a) Élément C en causalité dérivée. (b) Élément C en causalité intégrale

La loi caractéristique de l'élément incertain C en causalité intégrale avec une incertitude multiplicative est donnée comme suit:

$$\begin{aligned}
 e_C &= \frac{1}{C_n} (1 + \delta_{1/C}) \int f_C dt + e_{C_0} \\
 &= \frac{1}{C_n} \int f_C dt + \delta_{1/C} \left(\frac{1}{C_n} \int f_C dt \right) + e_{C_0} \\
 &= \frac{1}{C_n} \int f_C dt - w_{1/C} + e_{C_0}
 \end{aligned} \tag{2.54}$$

avec $\delta_{1/C} = \frac{-\Delta C}{C_n + \Delta C}$, $w_{1/C}$ l'entrée fictive qui représente l'incertitude sur l'effort à la sortie de l'élément C . e_{C_0} est une constante qui représente les conditions initiales.

2.5.3.4 Modèles BG-LFT des éléments TF

Le transformateur TF conserve la puissance, mais relie les efforts entre eux et les flux entre eux.

La loi caractéristique de l'élément incertain TF en causalité m s'écrit comme suit:

-Relation entre les efforts:

$$\begin{aligned}
 e_1 &= m_n (1 + \delta_m) e_2 \\
 &= m_n e_2 + m_n (\delta_m e_2) \\
 &= m_n (e_2 - w_b) \text{ avec } w_b = -\delta_m e_2
 \end{aligned} \tag{2.55}$$

-Relation entre les flux:

$$\begin{aligned}
f_2 &= m_n (1 + \delta_m) f_1 \\
&= m_n f_1 + m_n (\delta_m f_1) \\
&= m_n (f_1 - w_a) \text{ avec } w_a = \delta_m f_1
\end{aligned} \tag{2.56}$$

avec $\delta_m = \frac{\Delta m}{m_n}$.

m_n , δ_m et Δm représentent respectivement la valeur nominale, l'incertitude multiplicative et l'incertitude additive sur le module de l'élément TF . e_1 , f_1 et e_2 , f_2 , sont respectivement l'effort et le flux à l'entrée et à la sortie de l'élément TF . w_a , w_b sont des entrées fictives.

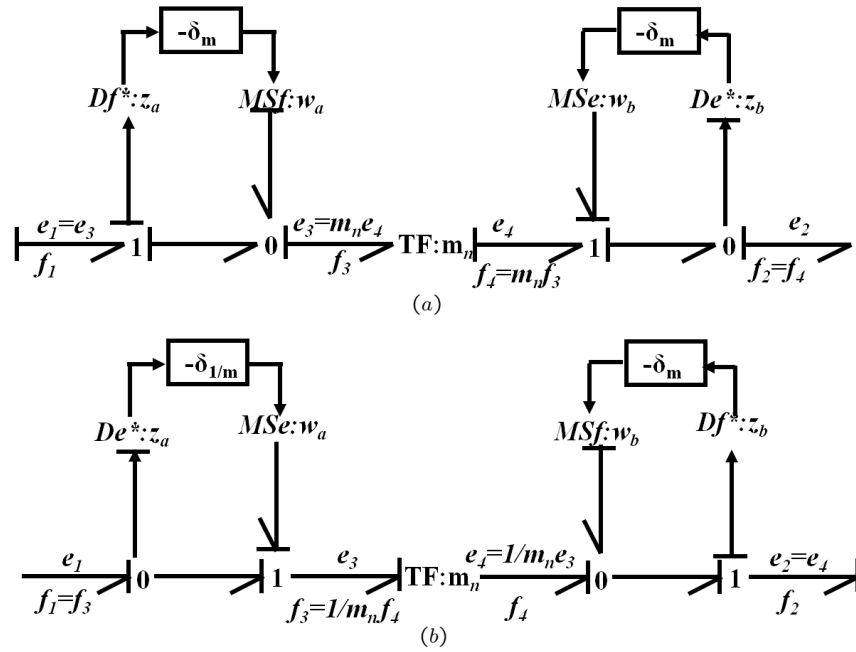


FIG. 2.42 – Élément TF avec les deux types de causalité.

Le modèle bond graph de l'élément TF en causalité m avec incertitude multiplicative est donné Fig. 2.42 (a).

La loi caractéristique de l'élément incertain TF en causalité $\frac{1}{m}$ est donnée comme suit:

-Relation entre les efforts:

$$\begin{aligned}
e_2 &= \frac{1}{m_n} \left(1 + \delta_{\frac{1}{m}} \right) e_1 \\
&= \frac{1}{m_n} (e_1 + w_a) \text{ avec } w_a = \delta_{\frac{1}{m}} e_1
\end{aligned} \tag{2.57}$$

-Relation entre les flux:

$$\begin{aligned}
 f_2 &= m_n (1 + \delta_m) f_1 \\
 &= m_n f_1 + m_n (\delta_m f_1) \\
 &= m_n (f_1 - w_a) \text{ avec } w_a = \delta_m f_1
 \end{aligned}
 \tag{2.58}$$

avec $\delta_{\frac{1}{m}} = \frac{-\Delta m}{m_n + \Delta m}$.

Le modèle bond graph de l'élément TF en causalité $\frac{1}{m}$ avec incertitude multiplicative est donné Fig. 2.42 (b).

2.6 Application à un système chimique

2.6.1 Description du procédé

Le système à modéliser, Fig.2.43, est un réacteur chimique continu parfaitement agité (CSTR) adiabatique, dans lequel se déroule une réaction réversible exothermique. Cette réaction est définie comme suit :



Dans ce cas, les coefficients stœchiométriques sont égaux à un.

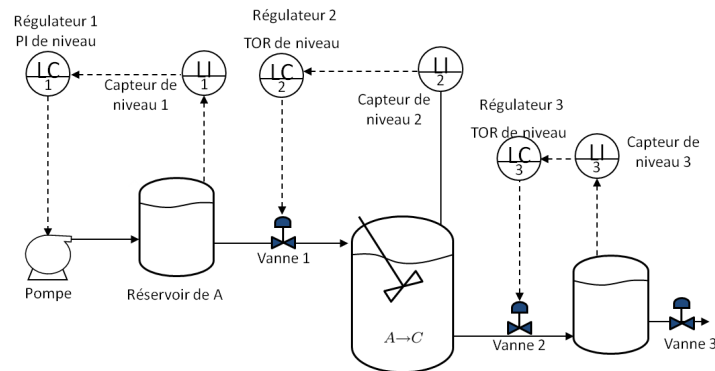


FIG. 2.43 – Schéma technologique du processus

Le système d'alimentation du réacteur par le constituant A (réactif) est constitué d'un réservoir de stockage et d'une pompe. La régulation du niveau (LC) est garantie par le biais d'un régulateur PI agissant sur une pompe centrifuge qui alimente le réservoir continuellement.

La commande du niveau dans le réacteur est assurée par un régulateur TOR (Tout Ou Rien) qui agit sur une vanne à l'entrée du réacteur. Le réservoir contenant les constituants (A, C) est commandé en niveau par un régulateur (TOR) qui agit sur une vanne automatique à la sortie du réacteur.

2.6.2 Modélisation BG-LFT

2.6.2.1 Bond graph à mots

Pour établir le modèle bond graph certaines hypothèses sont considérées : le réacteur est parfaitement agité de sorte que la température et les concentrations de différentes espèces chimiques soient homogènes dans tout le mélange de la réaction, le mélange de la réaction se compose d'une phase liquide homogène, et aucun changement de phase n'est considéré et la pression et le volume du liquide dans les réservoirs sont constants *R. El Harabi & al. (2011) [143]*.

Le système étudié est décomposé en sous systèmes comme le montre le Bond Graph à mots de la Fig. 2.44. Les différents sous-systèmes (le réacteur, la pompe, les réservoirs et les vannes,...) et leurs interconnexions sont facilement identifiés. Il est aussi bien possible de visualiser au moyen des demi flèches la distribution d'énergie le long du système.

Le système est caractérisé par un couplage de trois énergies : chimique, thermique et hydraulique. Les variables de puissance utilisées pour représenter le système sont basées sur la modélisation en pseudo bond graph. La partie hydraulique est caractérisée par la paire pression-débit massique (P, \dot{m}) , tandis que la partie thermodynamique est représentée par la paire (T, \dot{H}) , décrivant le phénomène de convection (matière en mouvement), et la paire (T, \dot{Q}) représentant le phénomène de conduction (stationnarité de la matière). Pour le domaine chimique, le couple de variables est (potentiel chimique μ , flux molaire \dot{n}).

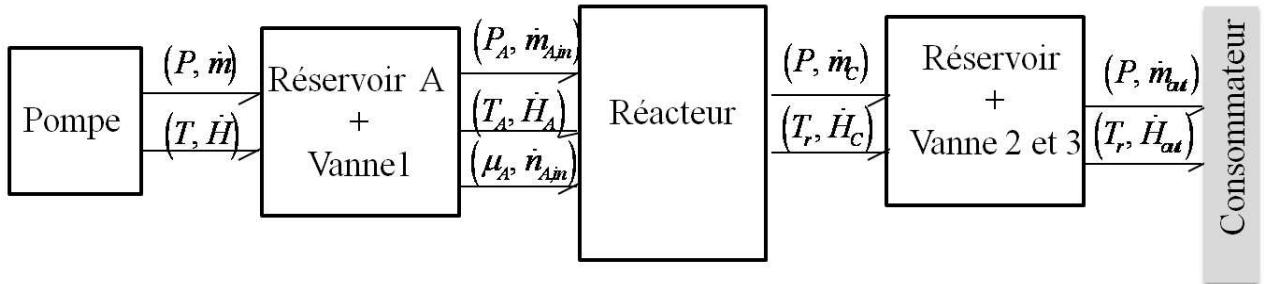


FIG. 2.44 – Bond Graph à mots du réacteur chimique

2.6.2.2 Modèle Bond graph

Partant de la conservation de la masse et de l'énergie, on a établi un modèle pseudo-bond graph de ce système en causalité intégrale préférentielle (Fig. 2.45), décrivant les principaux phénomènes de transfert de masse et d'espèces chimiques. Le transfert thermique n'est pas pris en compte car la température est considérée constante. Dans le réacteur, il n'y a pas accumulation de matière. Il y a que la réaction chimique.

Dans le domaine chimique, les jonctions 0 représentent l'équilibre molaire de chaque constituant (A, C). La jonction 1 est utilisée pour indiquer l'égalité des flux molaires de réaction des différentes substances. Les transformateurs TF modélisent les transformations chimiques des réactifs de la réaction en produits. Les modules de ces transformateurs désignent les coefficients stoechiométriques de la réaction (selon l'équation (2.60)). La cinétique de la réaction peut être modélisée par un multiport résistif, dont la loi constitutive est algébrique et relie le flux J et l'effort A (affinité chimique), *A. R. Khaled & al. (2006) [128]* *A. Perelson & al. (1975) [144]*. Cette puissance chimique $A \times J$ qui se dissipe dans le multiport \mathbb{R} génère une puissance thermique $T \times \dot{S}$ vers le réacteur.

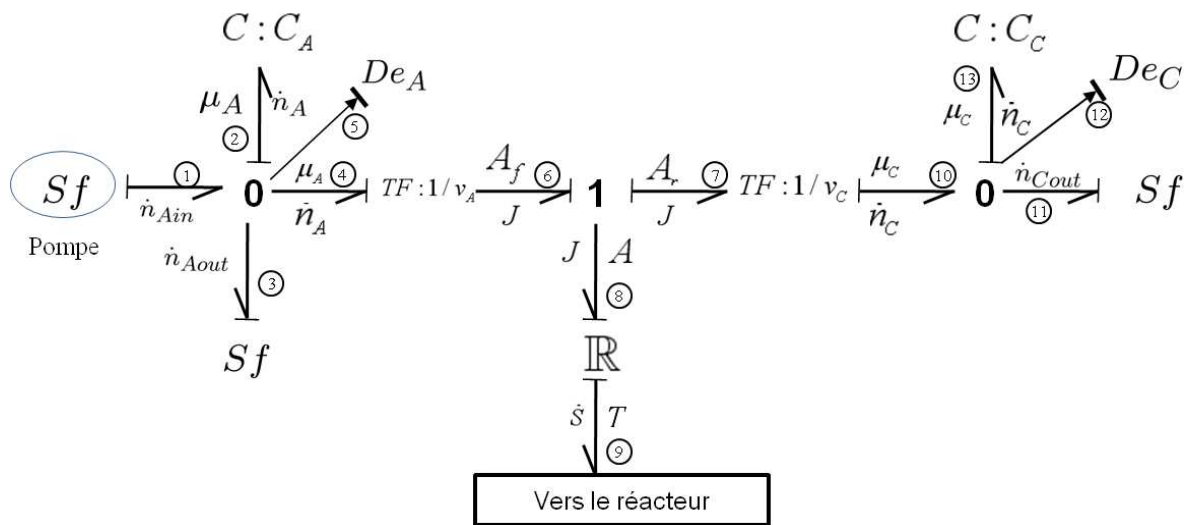


FIG. 2.45 – Modèle BG déterministe en causalité intégrale du domaine chimique de la réaction

Le passage d'un modèle Bond Graph déterministe à un modèle incertain sous forme LFT consiste donc à introduire des sources modulées d'effort ou de flux, qui sont ajoutées respectivement au niveau des jonctions 1 ou 0. Ainsi, le modèle reste causalement correct et ses propriétés structurelles ne sont pas modifiées (commandabilité, observabilité,...). De plus, ces sources modulées sont causalement liées au reste du modèle, où leur apport énergétique se propage sous forme d'effort ou de flux, et s'ajoute au bilan énergétique au niveau des jonctions. Cette forme standard est donc la mieux adaptée au diagnostic des systèmes à paramètres incertains.

Le modèle bond graph du système en causalité intégrale est donné par la Fig. 2.45, et le modèle bond graph incertain sous forme LFT du système est donné par la Fig. 2.46. Ce modèle est construit plus facilement qu'un modèle d'état et représente fidèlement le système réel. Les incertitudes paramétriques $\delta_1 = \delta_{1/C_A}$, $\delta_2 = \delta_{1/C_C}$ et $\delta_3 = \delta_{1/\mathbb{R}}$ correspondent à des composants matériels et paramètre physique bien précis. Les interactions entre les efforts

(ou les flux) introduits par les paramètres nominaux et les incertitudes sont assurées par les contraintes causales et structurelles du modèle; les efforts (ou les flux) se propagent en suivant des chemins causaux et s'ajoutent au niveau d'une jonction 1 (ou d'une jonction 0).

Calculons le modèle d'état de la réaction chimique à partir du modèle bond graph LFT de la Fig. 2.46. Les variables d'état sont $[n_A \ n_C]$ et désignent le nombre de moles A et C , le vecteur d'état et sa dérivée s'écrivent:

$$x = \begin{pmatrix} \int f_2 dt \\ \int f_{13} dt \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} n_A \\ n_C \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix}; \quad \dot{x} = \begin{pmatrix} f_2 \\ f_{13} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \dot{n}_A \\ \dot{n}_C \end{pmatrix} \quad (2.60)$$

La représentation LFT d'un élément Bond Graph, dont la loi caractéristique est une fonction linéaire ou non linéaire d'un ensemble de paramètres, ne diffère pas de celle des paramètres indépendants. Les incertitudes sont évaluées, puis introduites sur le modèle nominal (sur les éléments C_A et C_C et le multiport \mathbb{R}) sous forme multiplicative.

Les entrées correspondant aux incertitudes paramétriques sont modulées par les expressions suivantes:

$$\begin{cases} w_1 = -\delta_1 z_1 \\ w_2 = -\delta_2 z_2 \\ w_3 = -\delta_3 \Phi(\mathbb{R}_n, A) z_3 \end{cases} \quad (2.61)$$

Les incertitudes multiplicatives δ_i sur les paramètres i sont liées aux incertitudes additives Δi , et aux valeurs nominales i_n par les relations suivantes: $\delta_1 = \frac{-\Delta C_A}{\Delta C_{A,n} + \Delta C_A}$, $\delta_2 = \frac{-\Delta C_C}{\Delta C_{C,n} + \Delta C_C}$ et $\delta_3 = \frac{-\Delta \mathbb{R}}{\Delta \mathbb{R}_n + \Delta \mathbb{R}}$.

δ_1 , δ_2 , δ_3 , $C_{A,n}$, $C_{C,n}$ et \mathbb{R}_n sont respectivement les incertitudes multiplicatives et les valeurs nominales des éléments C_A et C_C et le multiport \mathbb{R} . Les entrées fictives w_1 , w_2 et w_3 correspondent respectivement aux incertitudes sur les éléments $C_{A,n}$, $C_{C,n}$ et \mathbb{R}_n .

Les valeurs z_1 , z_2 et z_3 sont déterminées à partir du modèle bond graph de la Fig. 2.46 comme suit :

$$\begin{cases} z_1 = \dot{n}_A = C_A \frac{d\tilde{D}e_A}{dt} = C_A \frac{d\mu_A}{dt} \\ z_2 = \dot{n}_C = C_C \frac{d\tilde{D}e_C}{dt} = C_C \frac{d\mu_C}{dt} \\ z_3 = e_6 = A_f = \nu_A^f \mu_A = \nu_A^f \left(\mu_A^0 + RT \text{Log} \left(\frac{\int \dot{n}_A dt}{V} \right) \right) \end{cases} \quad (2.62)$$

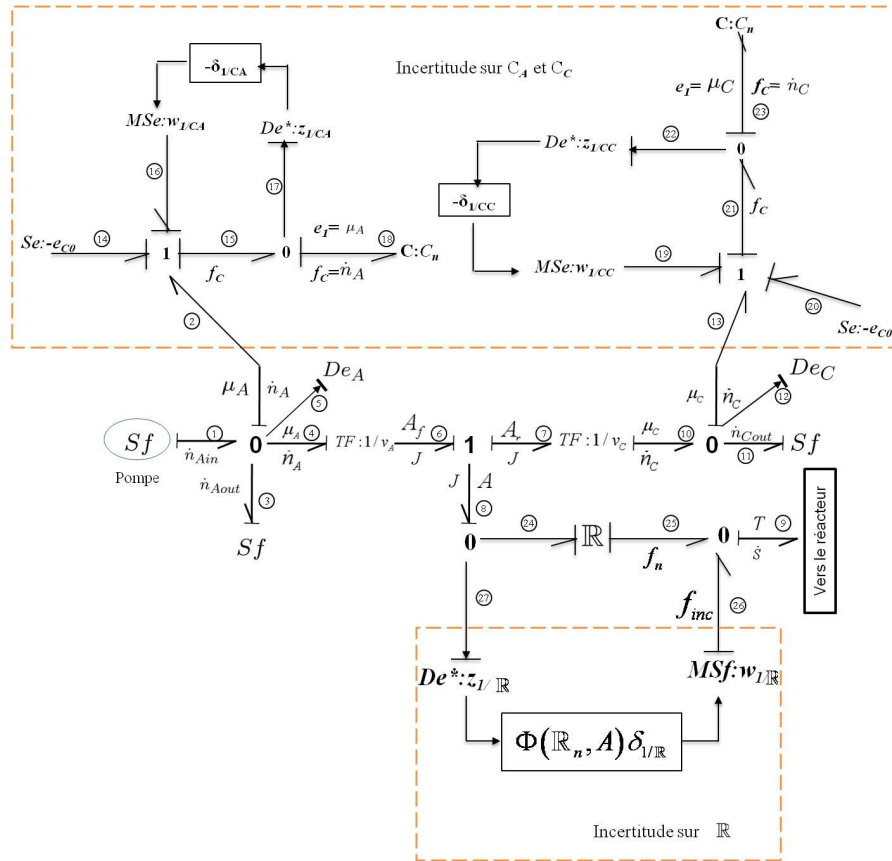


FIG. 2.46 – Modèle BG-LFT en causalité intégrale de la réaction chimique

2.7 Conclusion

Les procédés chimiques sont des procédés complexes, faisant intervenir des réactions chimiques, dont les caractéristiques sont très difficiles à appréhender et la modélisation de ce type de système est une étape très importante dans un schéma de diagnostic, car les performances recherchées de détection et d'isolation de fautes dépendent fortement de la précision du modèle.

Ce chapitre est consacré à la modélisation thermodynamique et cinétique des réactions et des réacteurs chimiques à l'aide des bonds graph en vue de leur surveillance. Une classification des composants thermo-chimiques et des phénomènes liés à une réaction physico-chimique dans le but de créer des modèles fonctionnels et dynamiques valides a été présentée. Alors, vu la classification variée des différents types de réactions chimiques, une méthodologie pour la représentation d'une catégorie limitée (réacteurs à paramètres localisés) a été abordée. Ces modèles déterministes ne peuvent être utilisés pour des situations réelles, les processus chimiques sont généralement à paramètres incertains.

Ainsi, nous avons montré dans ce chapitre que le parcours des chemins causaux entre les incertitudes et les sorties permet de suivre la propagation de leurs influences à travers le modèle en utilisant une approche LFT. La modélisation LFT des éléments bond graphs offre des avantages du point de vue analyse structurelle et implémentation informatique. Cette forme standard de modélisation des systèmes incertains n'introduit pas de nouveaux éléments bond graph sur le modèle. Par conséquent, aucun changement ne se produit dans l'ordre du système et dans ses propriétés structurelles. L'analyse structurelle peut alors se faire directement sur le modèle déterministe. D'un point de vue implémentation informatique, le passage à la forme LFT ne fait pas apparaître des boucles algèbro-différentielles très contraignantes dans la résolution numérique des équations. Alors, l'outil bond graph grâce à sa nature graphique et multiphysique (par son architecture), causale et structurelle (par ses propriétés) est bien adapté à ce type de problème.

Toutefois les performances du système de surveillance dépendent principalement de la qualité et de la robustesse du modèle. La prise en compte des incertitudes paramétriques du modèle bond graph pour une génération de RRAs robuste et une application sur un procédé réel seront traitées dans les chapitres suivants.

Chapitre 3

Génération des Algorithmes de Surveillance Robustes

3.1 Introduction

Plusieurs travaux ont été proposés dans la littérature pour développer des méthodes de diagnostic robuste des réacteurs chimiques à paramètres incertains. Les approches s'étendent, comme nous l'avons vu, des méthodes analytiques (observateur, filtre du kalman, espace de parité...) à l'intelligence artificielle et aux méthodes statistiques. Cet intérêt se traduit par le fait que les systèmes chimiques sont complexes et non stationnaires et les industriels cherchent plus de sécurité et de rendement. La non-linéarité et la sensibilité de certains paramètres influencent la marche de la réaction chimique. Une faible variation d'un de ces paramètres peut changer énormément le cours de la réaction et pourrait même causer des nombreux accidents.

Les outils de modélisation des procédés développés au chapitre 2 sont systématiquement introduits dans des méthodologies de conception de systèmes de surveillance robuste. Le présent chapitre est consacré à la mise en place de méthodes permettant de détecter et d'isoler les défaillances survenant au sein d'un système thermochimique à paramètres incertains, modélisé par un bond graph multiénergie couplé. Les procédures systématiques de génération des RRAs à partir des modèles bond graph non linéaires pour détecter des fautes pouvant affecter le processus physique, les actionneurs, et le système de régulation sont développées.

L'approche bond graph proposée dans ce chapitre permet, par sa structure énergétique et multiphysique, d'utiliser un seul outil pour la modélisation, l'analyse structurelle, la génération des RRAs incertaines et des seuils adaptatifs de fonctionnement normal, ainsi que l'analyse de la sensibilité des résidus. En effet, l'utilisation d'un modèle bond graph sous forme LFT permet de générer des RRAs constituées de deux parties parfaitement séparées : une partie nominale, qui représente le résidu, et une partie incertaine, qui sert à la fois au calcul des

seuils adaptatifs de fonctionnement normal et à l'analyse de sensibilité.

3.2 Types de défauts dans un réacteur chimique

La surveillance d'un réacteur chimique demande tout d'abord une étude détaillée des différentes formes de défaillances qui peut l'atteindre lors de son fonctionnement. Dans la littérature, les défauts sont classifiés selon leur localisation d'occurrence dans le système. Il peut apparaître au niveau des capteurs, des actionneurs ou au niveau de processus lui-même (Fig. 3.1).

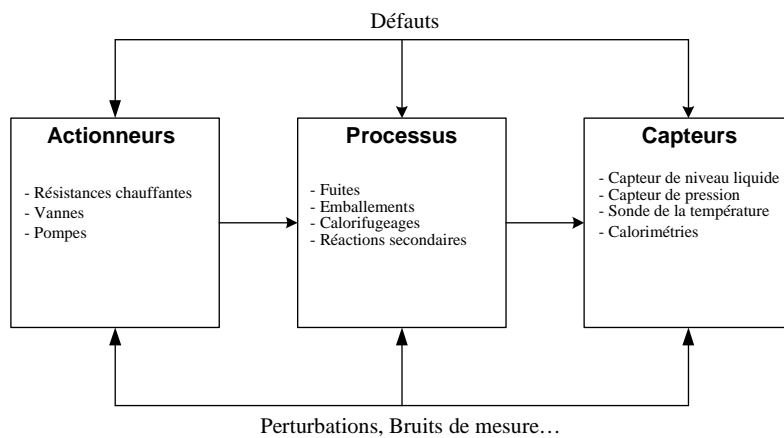


FIG. 3.1 – Défauts dans une installation chimique : cas d'un réacteur

3.2.1 Défauts actionneurs

Les défauts actionneurs agissent au niveau de la partie opérative et détériorent le signal d'entrée du système. Ils représentent une perte totale (défaillance) ou partielle d'une action de commande agissant sur le système. Tout un ensemble d'actionneurs (vannes, pompes, . . .) permettront de piloter les débits et les pressions des différents circuits dans un réacteur. Les défauts actionneurs peuvent se présenter au niveau de :

- *Résistance chauffante* : Les systèmes de production de chaleur (résistances chauffantes) seront pilotés pour contrôler les quantités de chaleur produites afin de refléter le comportement non-linéaire des réacteurs chimiques. Ainsi, ces défaillances sont présentés sous forme d'un chauffage inadapté du à un excès de vapeur lors de la mise en température du milieu réactionnel, chauffage par le rayonnement thermique trop rapide, chauffage à des températures supérieures à la température de décomposition du milieu. . .) ou une mauvaise répartition du chauffage du milieu réactionnel.

- *Vannes* : Ces actionneurs de type continu ou Tout ou Rien assurent sur les procédés

des fonctions utilitaires (mise en service de fluides, ...) ou des fonctions de sécurité (isolement d'appareil, ...). Parmi les cas de défaillance, on cite les cas d'une vanne qui ne ferme pas ou fuit quand son mécanisme de commande est actionné (un débit s'écoule), la saturation d'une vanne de reflux des condensats fermés ou le blocage de la vanne qui commande le débit du liquide de refroidissement. Ces situations provoquent ainsi un dysfonctionnement qui mène à l'emballement de réactions de synthèse.

- *Pompes* : En industrie chimique, il est souvent nécessaire d'utiliser d'onéreuses pompes en matériaux très résistants. En cas de marche à vide ou en présence d'une surpression, ces pompes sont soumises à des contraintes énormes en plus de leur usure normale. Ceci explique l'importance du contrôle de pression au niveau des pompes et de leur alimentation. Bien réalisée, cette fonction garantit une longue durée de vie de la pompe et la sécurité de toute l'installation. Une panne de pompe à vide lors d'une distillation sous vide engendre un refroidissement insuffisant. Il faut donc une visualisation des conditions de fonctionnement de la pompe (puissance hydraulique, électrique, rendement, ...). Une panne de la pompe de démarrage de l'agitateur entraîne un chauffage localisé du milieu réactionnel au point d'injection des réactifs ou au sein des échangeurs de chaleur, une mauvaise homogénéisation et la création de zones mortes.

3.2.2 Défauts capteurs

Ce type de défaut est la cause d'une mauvaise image de l'état physique du système. Un défaut capteur partiel produit un signal avec plus ou moins d'adéquation avec la valeur vraie de la variable à mesurer. Ceci peut se traduire par une réduction de la valeur affichée par rapport à la valeur vraie, ou de la présence d'un biais ou de bruit accru empêchant une bonne lecture. Un défaut capteur total produit une valeur qui n'est pas en rapport avec la grandeur à mesurer. Au contraire des actionneurs, les capteurs sont de petites dimensions dont la possibilité d'utiliser plus qu'un seul capteur pour la mesure d'une même grandeur.

Les défauts capteurs permettent d'avoir un contrôle non fiable et non adéquat (contrôle de température uniquement en partie basse) ce qui provoque une défaillance du système. Les capteurs doivent être régulièrement étalonnés. On vérifiera notamment que l'information fournie par le capteur correspond à la mesure effectuée. Cette vérification intervient avec une périodicité d'autant plus fréquente que la mesure est sensible pour la qualité de la production ou pour la sécurité de l'installation. Les principales mesures portent sur la température, le débit, le niveau et la pression.

Les différents types de capteurs fréquemment utilisés sont :

- Capteur de niveau liquide : Ce détecteur est un élément de sécurité important dans les réacteurs pour notamment éviter un débordement de cuve ou la marche à vide de pompes,
- Capteur de pression,

- Sonde de mesure de la température mal placée,
- Thermocouple recouvert d'un dépôt isolant,
- Calorimétrie: Le calorimètre de réaction fournit des informations quantitatives sur le rendement thermique de la réaction en fonction du temps, sur la chaleur de réaction, sur la chaleur spécifique de la masse réactionnelle ainsi que des données sur le transfert thermique de la masse réactionnelle, agitée, au niveau de la paroi tempérée du réacteur.
- Dispositif de mesure de pression est installé sur l'alimentation générale du réacteur,
- Capteur-transmetteur de débit: le capteur ci-dessous est un débitmètre à flotteur avec entraînement du système de transmission sous forme magnétique. Il mesure ici un débit d'air et transmet la mesure sous forme d'intensité. La mesure est donc transmise de manière continue.
- Détecteurs de seuil: parfois, il n'est pas nécessaire de connaître la valeur de la mesure mais de repérer un seuil uniquement. Des détecteurs peuvent alors être mis en œuvre. Ainsi, les bacs de stockage de produits pourront être équipés d'appareil détectant des niveaux hauts et bas.

3.2.3 Défauts systèmes

Ce type de défaut provient du système lui-même; bien souvent les défauts n'appartenant pas à un défaut capteur ou actionneur sont classés de manière arbitraire dans cette catégorie. Néanmoins, un défaut système ou composant résulte de la casse ou de l'altération d'un composant du système réduisant les capacités de celui-ci à effectuer une tâche. Ils sont dus souvent à la destruction structurelle donnant naissance à une modification de comportement dynamique du processus commandé *F. Stoessel. (2008) [145]*.

En pratique, ceci revient à considérer une modification des caractéristiques du système proprement dit. Vu leur diversité, ces défauts présentent une grande classe de situations inattendues et sont les plus difficiles à tolérer.

Dans le cas d'un réacteur chimique, le système étudié est la réaction chimique qui devient parfois incontrôlée; cette appellation désigne tout phénomène accidentel qui met en jeu une réaction chimique dont la maîtrise n'est pas assurée, qu'il s'agisse d'un emballement thermique de réaction, ou du mélange accidentel de deux produits incompatibles.

Une mauvaise connaissance de la chimie et des paramètres de sécurité du procédé causes liées à un manque d'informations sur la stabilité thermique des milieux réactionnels, sur les chaleurs de réactions et sur la nature et les conditions de formation des sous-produits de réaction. Ce qui donne naissance au cours de la déroulement de la réaction à des phénomènes non prévus tels que les phénomènes de prise en masse, de changement de phase (décantation..) et la génération des réactions d'oxydation.

Les paramètres cinétiques (affinité chimique, potentiel chimique, vitesse globale de la réaction, constante de vitesse....) d'une réaction dans un milieu réactionnel dépend de la

température. Ainsi, l'instabilité thermique d'une réaction chimique influe sur le déroulement du mécanisme réactionnel ce qui provoque des modifications au niveau de la structure moléculaire du mélange.

Le processus peut être attaqué par les types de défauts suivants :

- *Défaillances physiques de type fuite* : le garnissage des plaques tubulaires flottantes est en contact avec l'air et peut éventuellement constituer une source de fuite et d'explosion potentielle. D'autres échangeurs présentent aussi des sources de fuite potentielle et devraient être inspectés avec soin. Il est nécessaire donc d'empêcher les dangers de ces phénomènes. Comme il existe un grand nombre de joints, il est important de les surveiller pour réduire le plus possible les risques d'explosion. Par ailleurs, les fuites par les fentes dans les canalisations, ou au niveau de la plaque tubulaire, posent un problème puisque le ventilateur disperse les vapeurs qui fuient.

Alors, on distingue des fuites matières (fuite de produit au sein du réacteur, fuite de pression ou du gaz dans un gazoduc) et des fuites d'énergie thermique (défaut de calorifugeage ou d'isolation thermique c.à.d la perte de la puissance thermique au niveau de parois du réacteur.). Ce type de défaut apparaît dans les processus de stockage d'énergie et dans les canalisations, dans les joints d'étanchéités, brides de raccordements etc...

Les défaillances physiques de type fuite de matière, fuite d'énergie thermique et d'énergie chimique seront notées respectivement par $Faute_C_h$, $Faute_C_t$ et $Faute_C_c$. Elles sont liées du point de vue bond graph aux éléments C hydraulique, C thermique et C chimique.

- *Défaillances physiques de type apparition des réactions secondaires* : Le défaut dans le domaine chimique (apparition d'événement secondaire, dégagement d'odeur toxique ou explosif, etc.) liés au phénomène de transformation de matière peut être détecté en l'associant à l'indicateur de fautes (RRA) issue de l'équation de balance des affinités chimiques déduite des jonctions.

- *Défaillances physiques de type emballement* : l'emballement de réactions de synthèse sont suite à un refroidissement inadapté, se produit aussi dans les zones mortes créées par l'agitateur.

- *Défaillances physiques de type bouchage* : ces défaillances apparaissent dans les canalisations suite à un encrassement ou à un dépôt de sédiments par exemple.

- *Défaillances physiques de type surremplissage* : le surremplissage et la mauvaise répartition du chauffage (contrôle de température uniquement en partie basse), le surcharge d'initiateur de polymérisation dans un prépolymérisateur, le surcharge de réacteur de fabrication de résines phénoliques et l'introduction trop rapide de soude.

Dans ce contexte, une mauvaise connaissance du domaine de sécurité et des phases stables du procédé. Citons à titre d'exemple *B. Martel. (2000) [146]* :

- un temps de séjour à haute température trop important (Réactions laissées sans sur-

veillance),

- une mise en œuvre de réactifs ou de catalyseurs trop concentrés,
- une mauvaise connaissance de l'influence du pH sur le procédé,
- une température de consigne trop basse (non démarrage de la réaction et accumulation de réactifs),
- une modification du mode opératoire sans étude de sécurité préalable,
- un mélange de déchets industriels incompatibles.

Ces causes influent sur la réaction par *A. Benuzzi & al. (1991)* [147] :

- la modification de la vitesse de réaction : variation du facteur de fréquence,
- l'augmentation ou la diminution de la température du milieu en agissant sur l'énergie d'activation,
- un dégagement de la chaleur,
- une augmentation importante dans la pression,
- la variation de l'évolution de la concentration,
- la conversion,
- l'accélération de l'affinité chimique.

Ces exemples de défaillance (d'accidents) permettent d'illustrer les dérives répertoriées ayant conduit à une perte de contrôle de procédés chimiques. En outre, le système de contrôle peut générer des défaillances : le contrôle de la température hors service uniquement en partie basse engendre en fait un surremplissage ou une réaction arrêtée avant la fin, cuve ou équipement non vidé non surveillé.

Parmi les risques qui causent une modification des paramètres cinétiques ou thermodynamiques est le problème d'instabilité thermique ont été à l'origine de divers accidents dans l'industrie : l'apparition des réactions secondaires (déviation de la réaction principale,..) et l'emballement thermique ; aussi, depuis vingtaine d'années des méthodologies strictes ont été mises en place dans beaucoup de sociétés de chimie fine, de manière à éviter tout risques d'accidents de l'extrapolation.

3.3 Génération de RRAs déterministes des systèmes réactifs

Les procédures de détection et d'isolation de fautes dans le présent travail sont basées uniquement sur les résidus générés par l'évaluation des RRAs *R. El Harabi & al. (2011)* [148]. En comparaison avec les méthodes de génération de résidus classiques (basées sur les observateurs,...), la méthode basée sur les relations de redondance analytique présente quelques caractéristiques intéressantes :

- elles sont simples à comprendre, puisqu'elles correspondent à des relations et des variables qui sont affichées par le modèle bond graph image du processus physique,

- ces relations sont déduites directement de la représentation graphique,
- elles peuvent être générées sous forme symbolique et donc adaptées à une implémentation informatique assurant de meilleures performances d'isolabilité et de détectabilité (les observateurs ne détectent que de fautes capteurs ou actionneurs).

3.3.1 Structure d'un système de surveillance

3.3.1.1 Représentation structurelle d'un système de surveillance

Un système de surveillance représenté par approche bond graph est constitué particulièrement de deux parties : une partie qui produit de la puissance et de l'énergie (modèle bond graph de puissance et l'ensemble des actionneurs) et une deuxième partie qui constituent le système d'information (c'est-à-dire les capteurs observateurs et systèmes de commande). Les algorithmes de surveillance (de détection et isolation des fautes) reçoivent les informations issues des capteurs (détecteurs d'effort et de flux) et délivrent au système de supervision les alarmes (Fig 3.2).

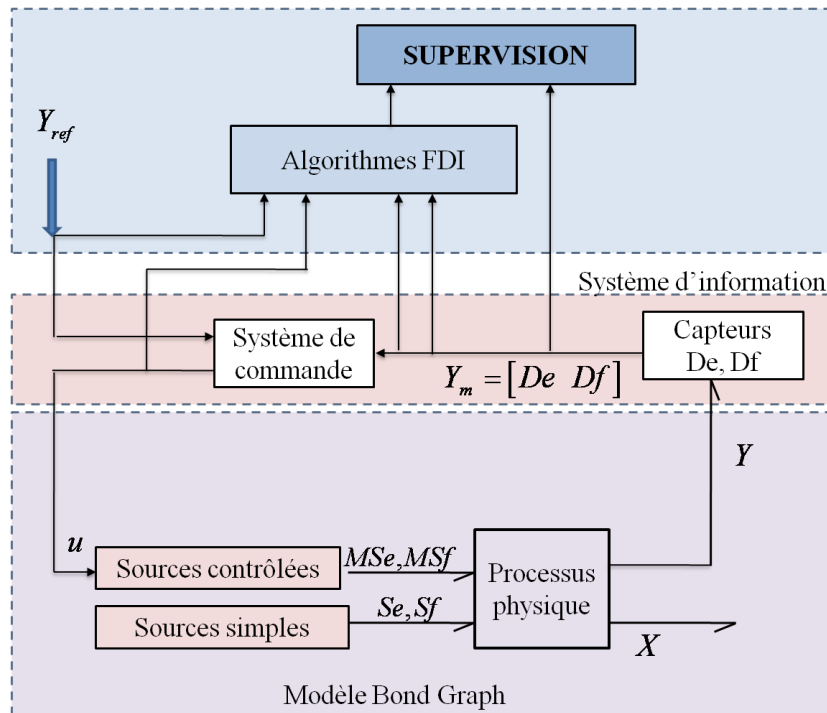


FIG. 3.2 – Représentation bond graph d'un système de surveillance

Les contraintes sur un modèle bond graph sont attribuées aux comportements des éléments R , C , I , RS , TF et GY , et aux jonctions 0, 1. Chaque élément est régi par une contrainte dite de comportement, contenant deux variables inconnues qui sont l'effort et le flux sur l'élément

bond graph. Les jonctions 0, 1 représentent la structure du système, elles décrivent le lien entre les différents éléments en définissant les relations de partage et de conservation d'efforts et de flux. Le détecteur d'effort est lié à une jonction 0 où l'effort est conservé, tandis que le détecteur de flux est lié à une jonction 1 où le flux est conservé.

L'ensemble des contraintes C regroupe des informations sur la structure C_J , le comportement C_b , les mesures C_m et le système du contrôle C_c .

$$C = \{C_J\} \cup \{C_{bi, i=\{R,RS,C,I,TF,GY\}}\} \cup \{C_d\} \cup \{C_m\} \cup \{C_c\}$$

Ces sous ensembles sont réparti comme suit :

- **Les contraintes structurelles** C_J : Ces contraintes sont indépendantes des notions métriques et représentent les lois de conservation de puissance dans un système, elles sont déduites des équations aux jonctions sur un modèle bond graph:

$$\begin{aligned} C_{J_1} & : \Phi_{J_1} (\sum e_i, \sum S e_k, \sum M S e_p) = 0 \\ C_{J_0} & : \Phi_{J_0} (\sum f_i, \sum S f_k, \sum M S f_p) = 0 \end{aligned} \quad (3.1)$$

où k et p sont respectivement le nombre de sources constantes et de sources modulées liées à la jonction.

- **Les contraintes de comportement** C_i : Elles regroupent l'ensemble des contraintes algébriques et différentielles, et décrivent les phénomènes physiques au niveau des éléments bond graphs.

$$\begin{aligned} C_R & : \Phi_R (f_R, e_R) = 0 \\ C_{RS} & : \Phi_{RS} (f_{1RS}, e_{1RS}, f_{2RS}) = 0 \\ C_{TF} & : \Phi_{fTF} (f_{1TF}, f_{2TF}) = 0 \text{ et } \Phi_{eTF} (e_{1TF}, e_{2TF}) = 0 \\ C_{GY} & : \Phi_{fGY} (f_{1GY}, e_{2GY}) = 0 \text{ et } \Phi_{eGY} (e_{1GY}, f_{2GY}) = 0 \\ C_C & : \Phi_C (\dot{e}_C, f_C) = 0 \\ C_I & : \Phi_I (e_I, \dot{f}_I) = 0 \end{aligned} \quad (3.2)$$

- **Les contraintes de dérivation** C_{df} et C_{de} : Ces contraintes ne sont pas directement liées au système physique, et elles n'apparaissent pas explicitement sur le modèle bond graph. Elles sont utilisées pour calculer la dérivée d'un flux ou d'un effort, car on utilise une causalité dérivée. Ces contraintes sont ajoutées à la matrice d'incidence et sont causales:

$$\begin{aligned} C_{df} & : \Phi_{\frac{df}{dt}} (f, \dot{f}) = 0 \Rightarrow \dot{f} = \frac{df}{dt} \\ C_{de} & : \Phi_{\frac{de}{dt}} (e, \dot{e}) = 0 \Rightarrow \dot{e} = \frac{de}{dt} \end{aligned} \quad (3.3)$$

- **Les contraintes de mesure** C_m : Elles décrivent les mesures qui sont disponibles. Elles expriment la façon dont les capteurs transforment quelques variables d'état du processus en

signaux de sortie, qui peuvent être utilisés pour la commande et le diagnostic. Sur un modèle bond graph, les capteurs d'efforts sont placés sur les jonctions 0 et les capteurs de flux sur les jonctions 1. La sortie du capteur donne la valeur de la variable de puissance commune à tous les liens de la jonction. Les contraintes de mesure sont définies comme suit

$$\begin{aligned} C_{mf} & : \Phi_{mf}(Df, f_J) = 0 \\ C_{me} & : \Phi_{me}(De, e_J) = 0 \end{aligned} \quad (3.4)$$

avec f_J le flux sur la jonction 1 lié au détecteur Df et e_J l'effort sur la jonction 0 lié au détecteur De .

- **Le modèle des algorithmes de commande C_{FC}** : Il décrit les algorithmes de commande dans lesquels les entrées des régulateurs sont les valeurs des consignes et de mesure des capteurs. Les sorties des régulateurs agissent sur les actionneurs représentés par des sources modulées d'effort (MSe) ou de flux (MSf).

$$C_{FC} : \Phi_{FC}(u_{ref}, Y_m, \theta_{reg}) = 0 \quad (3.5)$$

où θ_{reg} est un paramètre du régulateur (gain, temps d'intégration, etc.), u_{ref} et Y_m représentent respectivement la consigne et les sorties des capteurs.

Remarque : *Contrairement aux équations structurelles et de comportement qui utilisent les variables de puissance effort-flux comme variables d'entrée-sortie, les lois de commande et de mesure utilisent les signaux d'information.*

- **Le modèle des sources contrôlées C_{FA}** : Ces modèles décrivent les sources d'énergie contrôlées ou modulées par les signaux de commande (pompe régulée, source de tension commandée, etc.). Les signaux d'entrée u sont fournis par les régulateurs et les signaux de sortie sont les variables régulées MSe et MSf .

3.3.1.2 Représentation structurelle par bond graph

La méthodologie Bond Graph permet de traiter les chaînes d'énergie et d'information et elle peut être appliquée à tout type de systèmes physiques (linéaire, non linéaire, continue, discrète, numérique, électronique, mécanique, hydraulique...). La démarche se décompose en plusieurs étapes :

- la première étape consiste à étudier l'architecture du système, soit l'interconnexion des composants, soit le couplage des phénomènes physiques retenus, et à la reproduire graphiquement avec un langage unique pour tous les domaines de la physique.

- la deuxième étape consiste à décrire les lois consécutives des composants ou des phénomènes, linéaires ou non linéaires. Pour cela la notion de causalité est un atout majeur de cette technique.

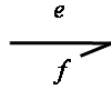
Par rapport aux modèles graphiques (présentés dans le premier chapitre) tels que digraphe, SDG, graphe biparti, le bond graph est aussi un graphe, mais les nœuds représentent des composants physiques associés aux éléments bond graph, et les arcs désignent la puissance échangée entre ces nœuds.

$$BG = G(S, A)$$

où $S = \{De\} \cup \{Df\} \cup \{Se\} \cup \{Sf\} \cup \{J_1\} \cup \{J_0\} \cup \{TF\} \cup \{GY\} \cup \{C\} \cup \{R\} \cup \{I\}$ est l'ensemble des sommets (nœuds).

et De et Df sont respectivement des détecteurs d'effort et du flux. Se et Sf sont respectivement des sources d'effort et du flux. J_1 et J_0 sont respectivement des jonctions d'efforts et du flux communs. TF et GY sont les éléments de transformation de puissance C , R , I sont les éléments passifs et actifs du modèle. Bond Graph.

A est la puissance échangée représentée par une demi flèche



et $e.f$ = puissance.

3.3.1.3 Propriétés causales des bond graphs à énergies couplées

A partir du modèle bond graph, il est donc aisé de construire le graphe bi-partite. Les deux sommets formant le graphe (variables et contraintes) sont déduits directement du modèle bond graph du système.

Le point de départ pour l'élimination des variables inconnues sur la matrice d'incidence déduite du graphe bi-partite est difficile à fixer. La détermination d'un couplage sur-déterminé pour la génération des RRAs sur un modèle bond graph se fait par l'élimination des variables inconnues contenues dans les contraintes de structure issues des équations aux jonctions 0 et 1.

Définition 1.1 (Chemin causal)

Un chemin causal est une alternance de liens et d'éléments (R , C , I) appelés nœuds telle que tous les nœuds ont une causalité complète et correcte, et deux liens du chemin causal ont en un même nœud des orientations causales opposées. Suivant la causalité, la variable traversée est l'effort ou le flux. Pour changer cette variable il faut passer par un élément de jonction GY , ou par un élément passif (I , C ou R).

Définition 1.2 (Boucle causale)

Une boucle causale est un chemin causal fermé partant de la sortie d'un élément R , I ou C , et revenant à l'entrée de cet élément sans parcourir le même lien en suivant la même variable plus d'une fois.

Définition 1.3 (Chemin causal généralisé)

Un chemin causal généralisé est un chemin causal qui peut traverser les liens de puissance et les liens d'information ou les deux. Le chemin causal généralisé est propre s'il ne contient que des liens de puissance. Il est impropre s'il contient au moins un lien d'information, *S*. Rimaux (1995) [149].

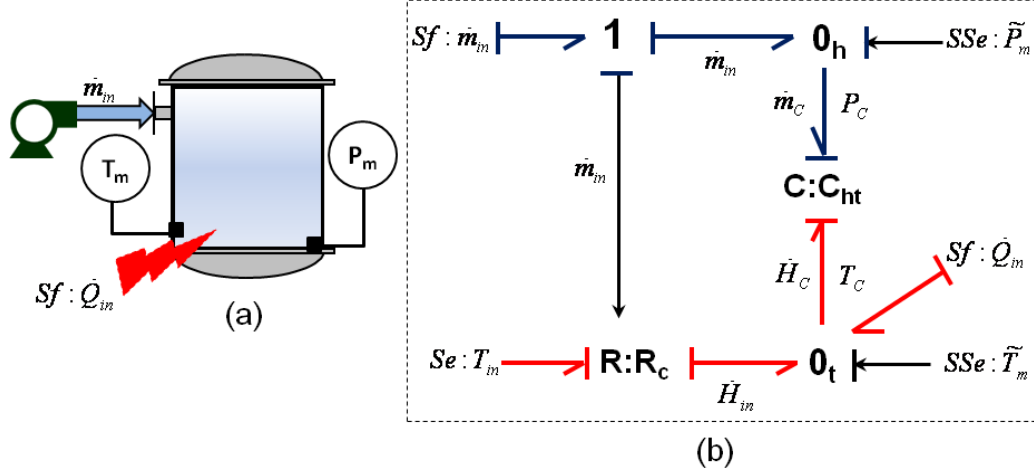


FIG. 3.3 – (a) Système d'échange de puissance. (b) Modèle Bond Graph en causalité dérivée

Exemple 1.1 Sur la figure 3.3 est représenté le modèle bond graph (b) du système thermofluide, Fig. 3.3 (a). $De : P_m$ et $De : T_m$ sont les capteurs des variables d'effort hydraulique (associée à la variable d'état volume ou masse) et thermique (associée à l'enthalpie totale H) respectivement. T_{in} et \dot{m}_{in} désignent la température et le débit massique du fluide à l'entrée.

Les deux ports C_{ht} représente le couplage de deux énergies (thermiques et hydrauliques) accumulé au sein du réservoir (le fluide est considéré ici sous l'état saturé). Le découplage des énergies est donné sous forme de deux capacités thermique C_t et hydraulique C_h . $Sf : \dot{Q}_{in}$, $Sf : \dot{m}_{in}$, and $Se : T_{in}$ représentent, respectivement, la source du flux thermique d'entrée, flux massique d'entrée, et la température de fluide (considéré constante).

Les indicateurs de faute sont générés à partir des lois de conservation de jonctions hydraulique 0_h et thermique 0_t du modèle Bond Graph :

$$\begin{aligned} \sum bi.f_i &= \dot{m}_{in} - \dot{m}_C = ARR_1 \\ \sum bi.f_i &= \dot{H}_{in} - \dot{H}_C = ARR_2 \end{aligned} \quad (3.6)$$

Les variables inconnues \dot{m}_{in} , \dot{m}_C , \dot{H}_{in} et \dot{H}_C sont éliminées en suivant les chemins causaux, donnés par le graphe orienté de la figure 3.4. ARR obtenu sont alors :

$$\begin{aligned} RRA_1 &= \dot{m}_{in} - C_h \dot{P}_m \\ RRA_2 &= c_p T_{in} \dot{m}_{in} + \dot{Q}_{in} - C_t \dot{P}_m T_m \end{aligned} \quad (3.7)$$

où C_h est l'élément de stockage d'énergie hydraulique $C_h = A/g$ avec A est la section du réservoir et g est la constante de gravité. Noter que la pression au fond du réservoir $P_C = \frac{g}{A} m_C = \frac{1}{C_h} \int \dot{m} dt$ est analogue à l'équation constitutive d'une capacité électrique $V_C = \frac{1}{C_h} \int i dt$. c_p est la capacité thermique spécifique du fluide d'entrée. C_t représente la capacité thermique globale du fluide stocké:

$$C_t = c_v A = g$$

où c_v est la capacité thermique spécifique du fluide.

Les résidus obtenus par l'évaluation des RRA_1 et RRA_2 sont sensibles non seulement aux défauts qui peuvent affecter les capteurs et les sources, mais également à la fuite de fluide et la mauvaise isolation thermique dans le réservoir. Cela est dû du fait que les RRAs sont déduites des lois de conservation d'énergie et de masse.

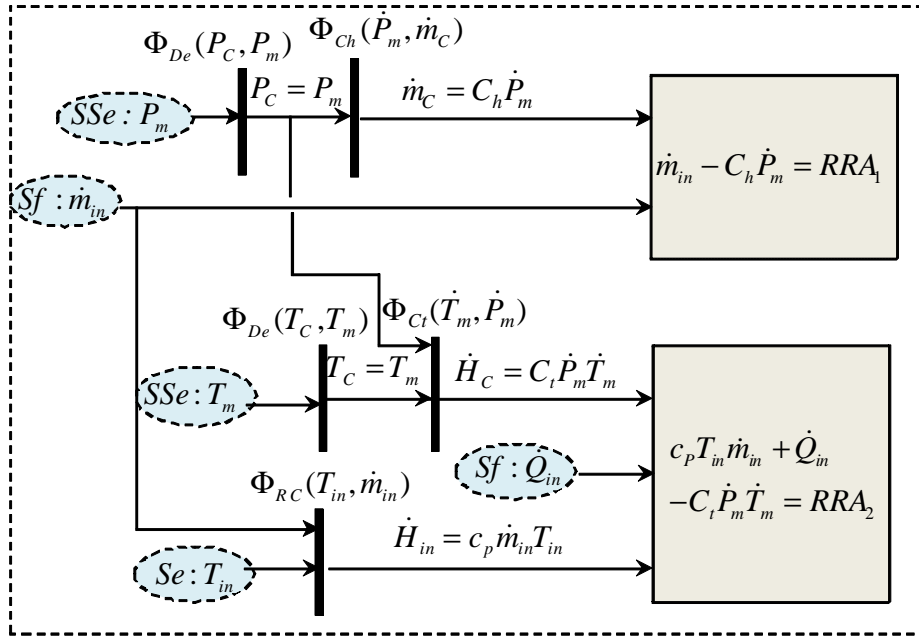


FIG. 3.4 – Graphe orienté menant à la génération des RRAs

D'après la figure 3.5, les chemins d'élimination des variables inconnus (de la source aux capteurs) sont donnés comme suit :

$$\mathbf{Sf} : \dot{m}_{in} \rightarrow \mathbf{De} : \mathbf{P}_m \Rightarrow f_1 \rightarrow f_2 \rightarrow f_3 \rightarrow \Phi_{C_h}^{-1}(\cdot) \rightarrow e_3 \rightarrow \mathbf{De} : P_m$$

$$\mathbf{Sf} : \dot{m}_{in} \rightarrow \mathbf{De} : \mathbf{T}_m \Rightarrow f_1 \rightarrow f_6 \rightarrow \Phi_{Rc}^{-1}(\cdot) \rightarrow f_7 \rightarrow f_8 \rightarrow \Phi_{C_t}^{-1}(f_8) \rightarrow e_8 \rightarrow \mathbf{De} : T_m$$

Ces deux chemins montrent le couplage de deux énergies (thermique et hydraulique). L'état thermique associé à l'enthalpie totale H et modélisé par l'élément C_h est influencé

par le flux hydraulique $Sf : \dot{m}_{in}$ selon deux chemins différents : par la variation de la masse stockée par l'élément C_t ou par la variation du flux d'enthalpie (voir équation de couplage chapitre 2).

Du point de vue de l'échange d'information, les causalités des liens d'information (représentés par une flèche) et des liens de puissance (représentés par une demi-flèche) sont différentes et permettent de définir la calculabilité de la variable.

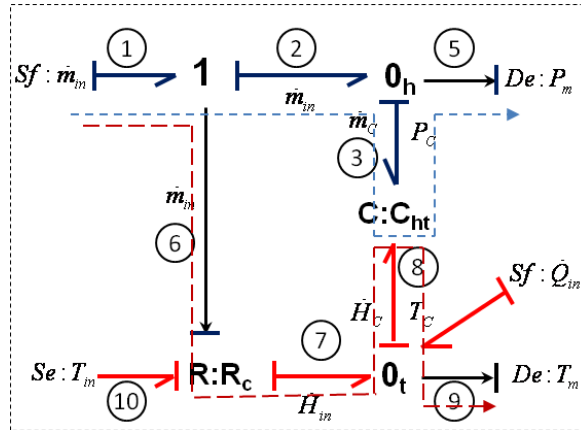


FIG. 3.5 – Chemin causal généralisé dans les modèles bond graphs à énergies couplées en causalité intégrale

– Un lien d'information impose un signal (représentant un effort ou un flux) dans un seul sens qui est celui de la flèche. Exemple, un régulateur impose un signal de commande à une vanne mais ne reçoit aucun signal de la part de celle-ci. Le cas le plus simple est bien sur le capteur. Sur le graphe orienté, l'arc liant deux sommets est orienté dans un seul sens.

– Sur un lien de puissance le chemin causal suit aussi bien l'effort que le flux. A titre d'exemple si à un composant vanne est imposé le flux (débit) (respectivement l'effort (pression)) ce même composant permet de calculer l'effort (respectivement le flux).

L'ensemble des contraintes déduit de la figure 3.6 sont

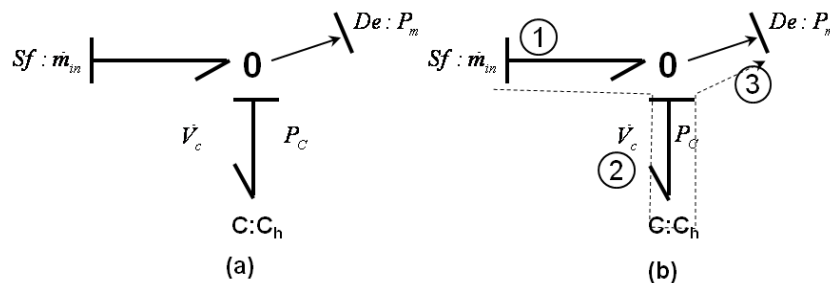


FIG. 3.6 – (a) Modèle Bond Graph du système hydraulique (b) Chemin causal

Contraintes structurales (loi de conservation de la jonction zéro) :

$$Sf : \dot{m}_{in} - f_2 = 0, e_1 = e_2 \quad (3.8)$$

Contraintes de comportement (équation constitutive d'élément C en causalité dérivée :

$$F(f_2, \frac{de_2}{dt}) = 0, \quad \text{dans le cas linéaire, on obtient : } f_2 = C_h \frac{de_2}{dt} \quad (3.9)$$

Contraintes de mesure :

$$e_2 = P_m \quad (3.10)$$

Les variables inconnus X et connus K sont respectivement comme suit

$$X = \{e_1, f_1\} \cup \{e_2, f_2\}$$

$$K = \{De : P_m\} \cup \{Sf : \dot{m}_{in}\}$$

Les contraintes de dérivation sont rajoutés quand le modèle est utilisé en causalité dérivée.

$$C_d : \dot{e}_2 = \frac{de_2}{dt} \quad (3.11)$$

Le graphe bipartite et sa matrice d'incidence sont donnés par la figure 3.7 (a et b).

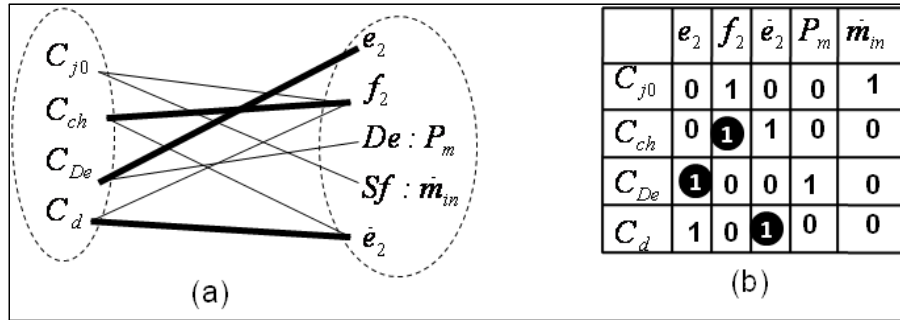


FIG. 3.7 – (a) Graphe Bipartite (b) Matrice d'incidence déduite à partir du Bond Graph.

3.3.2 Génération de RRAs en utilisant le graphe biparti

Sur un graphe biparti, la génération de RRAs repose essentiellement sur l'élimination des variables inconnues X en utilisant les contraintes C . Pour l'élimination des variables inconnues, la notion de couplage entre les variables et les contraintes est très importante.

L'application s définit le graphe bi-parti $G = (C, Z, A)$.

Il a été montré *A.K. Samantaray & B. Ould-Bouamama (2008)* [2] que l'approche Bond Graph permettait aisément de construire le graphe biparti. En effet, l'ensemble des contraintes constitue les relations de structure (dédiées de jonctions), de comportement (dédiées des éléments Bond Graph) et de mesures (issues des détecteurs). Les variables inconnues représentent

les paires des variables de puissance (e, f) des composants Bond Graph. Enfin, les variables connues sont celles des sources d'effort et de flux et des détecteurs.

Dans *A.K. Samantaray & B. Ould-Bouamama (2008)* [2], les lecteurs intéressés, peuvent aussi consulter les algorithmes de générations systématiques de RRAs à partir du modèle Bond Graph en causalité dérivée. Toutes ces procédures sont automatisées pour l'approche déterministe dans une boîte à outils du logiciel Symbols *B. Ould-Bouamama & al. (2006)* [3]. Un placement de capteur peut être proposé pour la surveillabilité des composants [150].

Ainsi, les variables qui ne sont pas couplées ne peuvent pas être calculées et celles qui peuvent être couplées de différentes façons peuvent être calculées différemment donnant lieu à des relations de compatibilité utilisées pour la surveillance du processus. Ces relations sont alors appelées RRAs. Une RRA est une contrainte calculée à partir d'un sous système surdéterminé et observable et exprimée en termes de variables connues du process. Une RRA a la forme symbolique suivante :

$$f(De, Df, Se, Sf, MSe, MSf, \theta, u) = 0 \quad (3.12)$$

où $De \dots$

L'évaluation numérique d'une RRA conduit à un résidu r :

$$r = f(De, Df, Se, Sf, MSe, MSf, \theta, u) \quad (3.13)$$

3.3.3 Parcours des chemins causaux

Le bond graph est un graphe dans lequel sont définis des boucles et des chemins causaux, parcourus en suivant la propagation de l'information effort ou flux, et quel que soit le sens des demis flèches.

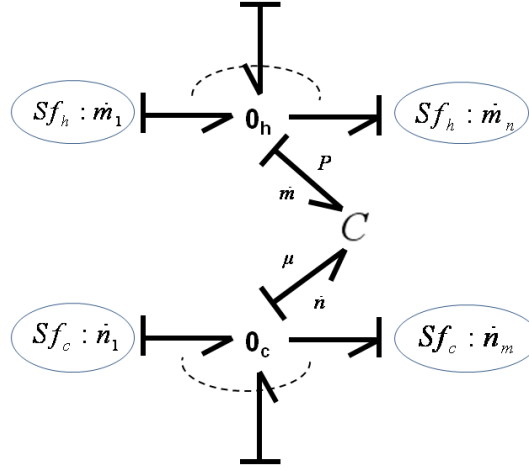
La génération des RRAs sur le bond graph est basée sur le parcours de chemins causaux sur le modèle graphique. Ceci est exprimé sur un graphe bi-parti orienté par l'ordre d'élimination des variables inconnues. Pour exprimer une variable inconnue en fonction des variables connues, l'étude des relations reliant ces variables aux sources et aux capteurs en parcourant les chemins causaux simples et généralisés est une méthode pratique et facile à appliquer.

Le parcours des chemins causaux n'est qu'un couplage particulier qui respecte la causalité affectée au modèle.

Le point de départ de l'algorithme pour la génération de RRAs peut appartenir à la structure de jonctions (0, 1, TF , et GY), i.e. les équations structurelles C_s aussi bien qu'à l'ensemble des composants R, C, I (les équations de comportement C_b) reliées à cette jonction.

Proposition 3. 2 *Les indicateurs de faute chimique (Relation de Redondance Analytique) générés à partir d'une jonction de type (0, 1, TF , et GY) ou à partir de la loi constitutive attachée à cette jonction sont identiques.*

Preuve. Considérons un modèle bond graph à énergies couplées (Figure 3.8). n et m sont respectivement le nombre de ports des énergies hydrauliques, modélisés par la paire des variables (P, \dot{m}) et chimiques modélisés par la paire des variables (μ, \dot{n}) . Sans perte de généralité, on considère que le multiport C est composé de deux éléments couplés : un élément hydraulique C_h connecté à la jonction hydraulique 0_h et un élément chimique C_c connecté à la jonction chimique 0_c .

FIG. 3.8 – *Modèle bond graph multi-énergie*

1. En partant de la jonction 0_c (loi de conservation d'espèce) on a :

$$C_{J_{0_c}} : \dot{n} + \sum_{i=1}^m a_i \dot{n}_i = 0 \quad (3.14)$$

a_i est une variable booléenne valant ± 1 selon l'orientation de la demi-flèche.

Pour exprimer les variables inconnues en fonction des variables connues à surveiller on passe par la relation régissant le comportement du composant C . Dans notre cas, la pression dépend aussi bien de l'énergie chimique \dot{n} que hydraulique \dot{m} on a :

$$C_C : \mu = \Phi_C(\dot{n}, \dot{m}) \quad (3.15)$$

En remplaçant l'expression de \dot{n} dans la relation (5.8), on obtient :

$$\Phi_C^{-1}(\mu, \dot{m}) + \sum_{i=1}^m a_i \dot{n}_i = 0 \quad (3.16)$$

2. En partant du multiport C . Le potentiel chimique est déterminé de l'équation constitutive de la capacité C couplée à l'énergie hydraulique \dot{m} . On a :

$$\mu = \Phi_C \left(- \sum_{i=1}^m (a_i \dot{n}_i, \dot{m}) \right) \quad (3.17)$$

d'où la relation :

$$\Phi_C^{-1}(\mu, \dot{m}) + \sum_{i=1}^m a_i \dot{n}_i = 0 \quad (3.18)$$

Cette dernière relation est équivalente à celle déduite en partant de l'équation de structure (équation (5.10)). Le même résultat pourrait être déduit pour la partie thermique et pour un autre type de jonction.

Les relations en partant de la jonction 0 (correspondant aux contraintes de structure C_s) et celles en partant de la relation constitutive régissant le comportement (correspondant aux contraintes de comportement C_b) d'un élément (équation (5.8)) sont donc bien équivalentes (équation (5.10)).

A partir de cette proposition, on peut se limiter à la génération de RRAs à partir des équations structurelles.

3.3.4 Génération de RRAs en utilisant le bond graph

La génération des RRAs à partir d'un modèle bond graph est équivalente à la détermination d'un sous système sur-déterminé sur la matrice d'incidence (image du graphe bi-partite). L'élimination des variables inconnues sur le bond graph se fait sur un couplage particulier à partir des équations de conservation générées aux jonctions 0, 1.

La génération de la RRA revient à éliminer les variables inconnues e_i et f_i par le parcours du chemin causal de la variable connue à la variable inconnue. (*B. Ould Bouamama & al. (2002) [151]*).

La calculabilité des variables dans une procédure de génération des RRAs est liée à la causalité et l'inversibilité ou non de la relation utilisée. Dans un système réactif, les causalités affectées aux bond graphs à énergies couplées sont complexes car les variables étant couplées, les causalités sont souvent imposées par le type de processus. L'affectation des causalités est systématique et suit les règles énoncées dans *D. Karnopp & al. (2000) [13]*, à la différence que dans notre cas, est considéré comme un élément bond graph tout composant thermochimique (représenté par un bond graph global).

Avant de procéder à la détermination des RRAs, on réalise le modèle architectural sur la base des classes prédéfinies. Nous allons déterminer trois ensembles de RRAs.

- Le premier ensemble concerne la partie énergétique du procédé (le système en boucle ouverte), comprenant le processus physique, les capteurs et l'ensemble des sources (actionneurs).

- Le deuxième ensemble de RRAs concerne le système d'information: les contrôleurs (ou algorithmes de commande) faisant intervenir les signaux délivrés par les capteurs (De et Df), les signaux de commande u et les consignes (comme paramètres).

- Enfin des RRAs complémentaires peuvent être déduites des sources contrôlées (actionneurs) en faisant intervenir les signaux de commande u et les variables de sortie MSf et MSe .

3.3.5 Algorithme de génération des RRAs du système chimique

Le Plan des Instruments Détaillés (P&ID) du processus chimique est considéré comme le point de départ de la modélisation et de la génération des RRAs. Il représente les composantes technologiques et les lignes pour leur connexion. Ce P&ID est nécessaire pour la topologie du système, mais ne donne pas des informations sur la réaction chimique et l'évolution du milieu réactionnel (les constituants/ espèces chimiques) et les type de phases, particulièrement pour le diagnostic des réacteurs chimiques. Alors, dans le cas d'étude du domaine chimique, on propose de rajouter à ce diagramme l'équation de la réaction, le type de phase et le mécanisme réactionnel (un plan détaillé du mécanisme réactionnel).

P&ID représente le modèle architectural du processus qu'on note Σ constitué de n composants thermo fluides (vanne, pompe, réservoir...) et m espèces chimiques (constituants).

Soit $COMP_i \in \Sigma$, $i = \{1...n\}$, le système des composants et $CONS_j \in \Sigma$, $j = \{1...m\}$, le système des constituants chimiques du milieu réactionnel, qui peuvent être présentés sous la forme $s(C_i, K_i \cup X_i, \theta_i)$, où C_i , K_i , X_i et θ_i sont respectivement l'ensemble des contraintes, des variables connues, des variables inconnues, et des paramètres déduits du modèle bond graph.

Un exemple pédagogique représentant un système réactif est donné afin d'illustrer la méthodologie (Figure 3.9).

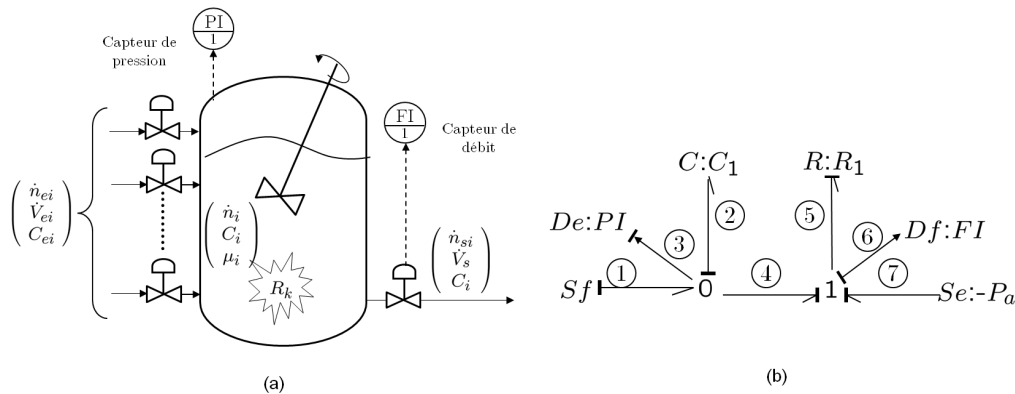


FIG. 3.9 – Système hydraulique illustratif: (a) schéma de principe (b) modèle bond graph en causalité intégrale (partie hydraulique)

On considère la partie hydraulique du système et son modèle en causalité intégrale. La procédure de générations des RRAs est donnée ainsi par les étapes suivantes:

1. Sur la base du modèle architectural, est élaboré pour chaque composant i son modèle bond graph acausal et son système d'instrumentation.

2. Le modèle bond graph est initialement déduit en causalité préférentielle intégrale (Fig. 3.9 (b))

3. Afin de générer les RRAs en causalité dérivée, le modèle est mis en causalité dérivée en utilisant la notion de dualisation des détecteurs (en transformant les détecteurs d'effort (de flux) en signal source d'effort (SSe) et de flux (SSf)). Cette étape permet de vérifier aussi l'observabilité structurelle des états. Si un des états ne peut pas être mis en causalité dérivée, l'état n'est pas observable. Le détecteur d'effort dualisé SSe et le détecteur de flux dualisé SSf imposent (à l'équivalent d'une source) leurs valeurs aux jonctions respectives 0 et 1. Si un capteur ne peut pas être dualisé, cela signifie qu'il existe une redondance matérielle (deux capteurs mesurant la même variable). C'est le cas où nous avons plusieurs capteurs connectés à une même jonction, alors seul un des capteurs peut être dualisé.

Un capteur (détecteur) dans un modèle destiné à la simulation permet d'indiquer la valeur numérique de la variable mesurée : il transforme la variable de puissance en un signal (sa réaction est nulle). Le chemin causal allant de la variable inconnue (à mesurer) vers la capteur (variable connue), permet d'analyser l'observabilité ou la commandabilité (quand il s'agit d'un chemin d'une source vers une variable d'état). Le sommet du graph est la variable inconnue et la destination la variable mesurée.

Le sommet du graph est la variable mesurée De ou Df et la destination représente la variable inconnue. L'ordre d'élimination est associé à un graph orienté (Fig 3.10). Le détecteur dualisé devient alors une source SSe ou SSf imposée à la jonction. La valeur du capteur est alors imposée à la contrainte.

$$(SSf \text{ ou } SSe) \xrightarrow{C_m^{-1}} (f \text{ ou } e)$$

FIG. 3.10 – Graphe orienté pour la surveillance

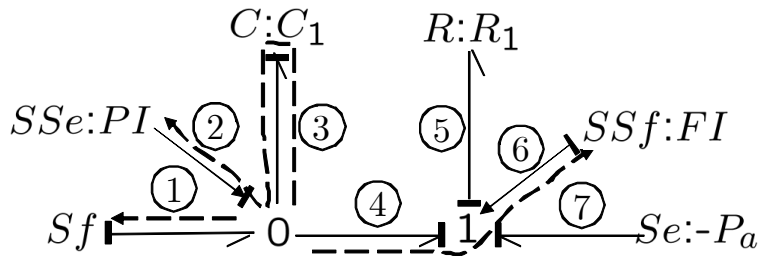


FIG. 3.11 – Modèle bond graph en causalité dérivée par dualisation des détecteurs

4. Dédire du bond graph en causalité dérivée, les relations de contraintes. Ayant six relations de contraintes et quatre variables inconnues, nous allons donc obtenir deux RRAs indépendantes.

Les RRAs candidates sont issues de l'équation de conservation aux jonctions 0 et 1. De la jonction 0, on a :

$$f_2 = f_1 - f_3 - f_4$$

f_2 est le flux fourni par le capteur $De : PI$. Ce flux est évidemment nul puisqu'un capteur est considéré comme un élément qui ne délivre pas de puissance. Un capteur d'effort reçoit une énergie qu'il transforme en un signal proportionnel à la pression, mais il n'intérage pas avec le système physique. f_2 est alors considéré comme générateur du résidu.

f_1 , f_3 , et f_4 sont les variables inconnues qu'il faut éliminer par le parcours d'un chemin causal (représenté en pointillés dans la figure 3.11). Ainsi, le chemin causal pour f_3 est

$$f_3 \longrightarrow \Phi_C \left(f_3, \frac{de_3}{dt} \right) \longrightarrow e_2 \longrightarrow De \longrightarrow PI$$

Alors la RRA est la suivante

$$RRA_1 = Sf - FI - C_1 \frac{dPI}{dt}$$

Le graphe orienté équivalent au première RRA est donné par la figure suivante

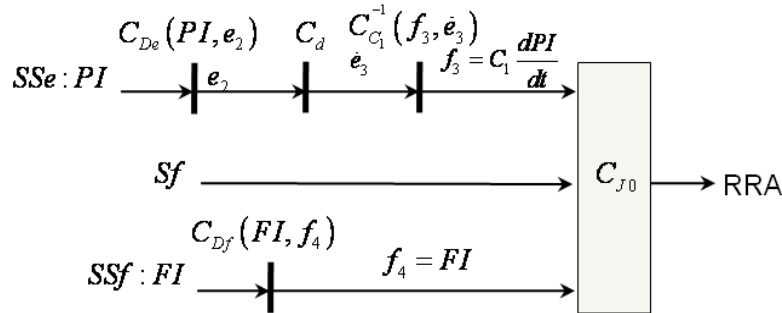


FIG. 3.12 – Graphe orienté équivalent à la première RRA.

5. Passer à la jonction suivante :

$$e_6 = e_4 - e_5 - e_7$$

e_4 et e_5 sont des variables inconnues. e_4 est déduit du chemin causal 3-2 : $e_4 \longrightarrow J_0 \longrightarrow SSe : PI$, et e_5 du chemin causal $e_5 \longrightarrow \Phi_R(e_5, f_5) \longrightarrow f_5 \longrightarrow D_f \longrightarrow FI$

On déduit alors la deuxième RRA :

$$RRA_2 = PI - R_1 FI + Se = 0$$

6. Si la deuxième relation de redondance analytique est indépendante de la première, alors la garder, sinon passer à une autre jonction: les deux RRAs ont des signatures différentes.

7. Répéter (5) jusqu'à ce que des signatures distinctes puissent être obtenues.

3.3.6 RRAs sensibles aux défaillances physiques

On a déjà cité les différents types de défaillances physiques dans le paragraphe 3.2. Nous étudions maintenant la sensibilité des RRAs par rapport à ces défaillances.

3.3.6.1 RRAs sensibles aux défaillances de type apparition des réactions secondaires

Proposition 3. 2: *Les résidus déduits de la relation de structure de la jonction de type 1 chimique seront sensibles à tout type de défaillance de type apparition des réactions secondaires.*

Preuve: Pour expliquer en détail la génération des indicateurs de faute sensible à la défaillance de type apparition des réactions secondaires, examinons le cas général d'un mélange formé de p constituants (w réactifs et $(p - w)$ produits) où se déroule une réaction dont l'équation est la suivante :

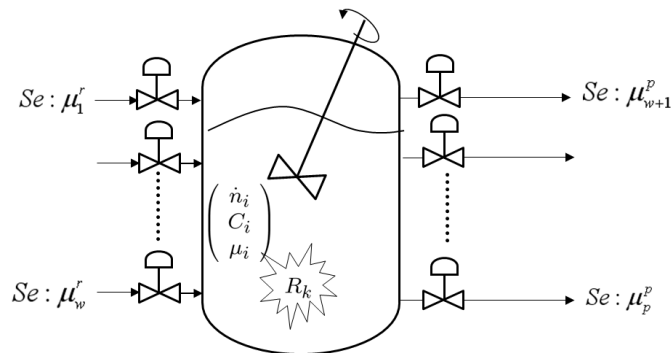


FIG. 3.13 – Schéma général d'un réacteur en domaine chimique.

La vitesse globale de la réaction $r_f = k_f(Tm_1) \prod C_j^{v_j}$ représente un terme non linéaire qui dépend de la température du milieu réactionnel, lié à l'équation d'Arrhenius et $C_j = \frac{n_j}{V}$ est la concentration d'un constituant j .

- Phénomène de génération de courant:

Concernant ce phénomène de génération de courant, le courant et le potentiel électrique engendré par une réaction d'oxydo réduction est exprimé par les relations:

$$\begin{cases} i = zFJ \\ e = A/zF \end{cases}$$

où z est le nombre d'électrons échangés et F c'est la constante de Faraday, ce qui s'exprime par l'ajouter d'un TF .

La $RRAc$, $r_{c,1}$, déduite de l'équation 5.14, est donnée par

$$RRAc = \sum_{i=1}^w v_i^f \mu_{i,m}^f - \sum_{i=w+1}^p v_i^r \mu_{i,m}^r + a_j \Phi_{RS}^{-1}(Tm_1, J_R) + A/zF = 0 \quad (3.21)$$

Cet indicateur de faute sensible à l'apparition des réactions secondaires. En effet, le déroulement d'une réaction indésirable influe sur la vitesse de la réaction plus précisément sur la constante de vitesse qui s'écrit en fonction d'énergie d'activation et de la température. Alors, le bilan de coefficient stœchiométrique et du potentiel chimique varient et l'expression de l'équation devient différente de zéro.

3.3.6.2 RRAs sensibles aux défaillances de type fuite

Proposition 3. 3 *Les résidus déduits de la relation de structure de la jonction de type 0 chimique (respectivement hydraulique et thermique) seront sensibles à tout type de défaillance de type fuite (appelée aussi fuite d'énergie potentielle chimique, hydraulique, et thermique).*

Preuve: Les équations constitutives d'une jonction 0 expriment que les liens reliés à cette jonction sont soumis au même effort et que la somme algébrique des flux circulant dans ces liens est nulle, ce qui correspond à une conservation d'espèce chimique (énergie potentielle chimique) (noté 0_c), d'énergie thermique (noté 0_t) et hydraulique (noté 0_h) dans les accumulateurs d'énergie. Elles s'écrivent :

$$\sum_{i=1}^n a_i f_{hi} = \sum_{i=1}^n a_i \dot{m}_i = 0 \quad (3.22)$$

$$\sum_{i=1}^{n+m} a_i f_{ti} = \sum_{i=1}^n a_i \dot{H}_i + \sum_{i=n}^m a_i \dot{Q}_i = 0 \quad (3.23)$$

$$\sum_{i=1}^l a_i f_{ci} = \sum_{i=1}^l a_i \dot{n}_i = 0 \quad (3.24)$$

$a_i = (-1, +1)$ selon sens du flux est entrant ou sortant. n , m et l désignent respectivement le nombre de ports hydrauliques (transférant de l'énergie hydraulique et thermique par convection \dot{H}), thermique (transférant de l'énergie thermique par conduction \dot{Q}) et chimique.

Partant des relations 3.22, 3.23 et 3.24 et en exprimant les variables qui y figurent en fonction des variables à surveiller on aboutit à des RRAs.

Soit r_{0h} le résidu généré à partir de l'équation 3.22 (par la procédure décrite plus haut). Il sera sensible à toute fuite de matière dans l'accumulateur puisque la loi de conservation de masse du modèle sans faute ne sera pas respectée.

Soit r_{0t} le résidu généré à partir de l'équation 3.23. il sera sensible à toute fuite de matière $Faute_C_h$ (car le flux d'enthalpie \dot{H} dépend du flux de masse \dot{m}) et d'énergie thermique $Faute_C_t$. Il sera par contre sensible uniquement à une fuite thermique si le défaut est de type calorifugeage. (la variable associé étant le flux par conduction \dot{Q}).

Soit r_{0c} le résidu généré à partir de l'équation 3.24. il sera sensible à toute fuite de d'énergie chimique $Faute_C_c$ d'énergie hydraulique (car le flux molaire \dot{n} dépend du flux de masse \dot{m}).

La table de signature théorique de défaillances physiques pour un accumulateur peut être présentée par le tableau 3.1.

r_0	r_{0h}	r_{0t}	r_{0c}	M_b	I_b
$Faute_C_h$	1	1	1	1	1
$Faute_C_t$	0	1	0	1	0
$Faute_C_c$	1	1	1	1	0

TAB. 3.1 – Signature de fautes physiques pour un accumulateur

La matrice de signature de défauts du tableau (Tab. 3.1) est déduite des équations précédentes, où M_b et I_b représentent respectivement l'état de détectabilité (M pour "Monitorability") et d'isolabilité du défaut sur chaque paramètre. Ils sont égaux à 1 lorsque le paramètre est surveillable, et 0 dans le cas contraire.

Remarque: Comme indiqué dans le chapitre 2, les sources de flux molaire (thermique et chimique) sont modulées par les sources hydrauliques. Un défaut (chimique, thermique ou hydraulique) peut provoquer un autre défaut de même type ou de type différent; et verse versa en fonction de condition thermodynamique (régime saturé, sous saturé).

3.3.6.3 RRAs sensibles aux défaillances de type bouchage

Proposition 3. 4 *Les résidus déduits de la relation de structure de la jonction de type 1 hydraulique (respectivement thermique) seront sensibles aux défaillances de type bouchage de matière (respectivement thermique ou calorifugeage).*

Preuve: Dans les processus de convection, le flux d'enthalpie est véhiculé par le transport du fluide, on considère qu'il n'y a pas de phénomène de conduction. C'est pourquoi le phénomène de convection dans une résistance est modélisé par deux liens de puissance séparés : un lien de puissance hydraulique modélisé par une jonction 1 et la résistance R , et un lien du thermique modélisé par la résistance de couplage modulée par l'information du débit représenté par un lien d'information (fig. 2.4).

La force motrice provoquant le déplacement du fluide est due à la différence des efforts : des pressions dans le cas hydraulique, des potentiels chimiques (ou des concentrations) dans le cas chimique (ou de diffusion), et des températures dans le cas de la conduction thermique. En bond graph, ces phénomènes sont modélisés par un élément résistif R_h accroché à une jonction 1 (loi de Bernoulli, loi de Fick, loi de Kirchhoff, ...).

La jonction 1 dans un processus thermofluide est liée à un élément R_h qui modélise dans le cas hydraulique une restriction et une résistance thermique dans le cas de la conduction et/ou radiation. La résistance hydraulique R_h le coefficient de perte de charge alors que la résistance thermique est associée au coefficient d'échange thermique.

Dans le cas général, le flux de matière transporté dépend des efforts hydraulique e_h et thermique e_t . Le flux de chaleur transporté par conduction \dot{Q} dépend de l'effort thermique e_t (gradient de température par exemple). Ces relations sont de type algébrique :

$$\phi_{R_h}(e_h, R_h, e_t, f_h) = 0 \quad (3.25)$$

$$\phi_{R_t}(e_t, R_t, \dot{Q}) = 0 \quad (3.26)$$

où R_h , et R_t représentent, respectivement, les résistances hydrauliques (coefficient de perte de charge), et thermique (coefficient d'échange de chaleur).

Partant des relations 3.25 et 3.26 et en exprimant les variables qui y figurent en fonction des variables à surveiller on aboutit à des RRAs.

Soit r_{1h} le résidu généré à partir de l'équation 3.25. Il sera sensible à des fautes de type bouchage hydraulique (encrassement des conduites, sédimentation, ...). Soit le r_{1t} le résidu généré à partir de l'équation 3.26. Il sera sensible à des fautes dues à un défaut d'encrassement des échangeurs de chaleur (dû à une variation du coefficient d'échange de chaleur).

3.3.6.4 RRAs sensibles aux défaillances des régulateurs

Ces RRAs sont déterminées sur la base des signaux délivrés par les capteurs (De, Df), les paramètres du régulateur θ_{reg} , le signal de commande u , et les points de consigne $y_{réf}$. Le

résidu sera :

$$RRA = f(De, Df, y_{réf}, u, \theta_{rég}) \quad (3.27)$$

3.3.6.5 RRAs sensibles aux défaillances des sources contrôlées

Les sources contrôlées transforment le signal de u (mesuré) en action réglante MSf ou MSe ou en une variable d'énergie (exemple: déplacement de la tige d'une vanne) qu'on considère aussi mesurée. Les RRAs (si elles existent) sont calculées sous la forme:

$$\begin{aligned} RRA_1 &= F_a(MSf, MSe, u) \\ RRA_{na} &= F_{a,na}(MSf, MSe, u) \end{aligned} \quad (3.28)$$

3.3.7 Matrice des signatures de fautes

Soit R_Σ l'ensemble des résidus déduits du modèle bond graph global Bond Graph de l'installation constitué de n_t composants thermofluides et de n_c constituants chimiques:

$$R_\Sigma = \{R_{t_1}\} \cup \{R_{t_2}\} \dots \cup \{R_{n_t}\} \cup \{R_{c_1}\} \cup \{R_{c_2}\} \dots \cup \{R_{n_c}\} \quad (3.29)$$

et R_i ($i = t_1, t_2, \dots, n_t, c_1, c_2, \dots, n_c$) le sous-ensemble des RRAs déduites du modèle bond graph MBG_i du composant i noté $COMP_i$

$$R_i = \{r_{i1}, \dots, r_{ij}, \dots, r_{il}\} \quad (3.30)$$

r_{ij} est le $j^{\text{ème}}$ résidu du composant, l est le nombre de résidus déduit du modèle bond graph du composant BG_i

r_i	Défaillances affectant le composant i, C_i				
	$Faute_{1, C_i}$	\dots	$Faute_{k, C_i}$	\dots	$Faute_{n_{F_i}, C_i}$
r_{i1}	1	0	0	0	0
r_{i2}	0	1	0	0	0
\dots	\dots	\dots	0	\dots	1
r_{ij}	\dots	\dots	1	\dots	\dots
r_{il}	0	0	0	0	1

TAB. 3.2 – Matrice des signatures des fautes

Soit $Faute_k$ ($k = 1 \dots n_{F_i}$) l'ensemble des fautes affectant $COMP_i$ l'ensemble des fautes affectant. n_{F_i} est le nombre de fautes auxquelles le sous-ensemble des résidus r_i est sensible.

Soit MC_i la matrice de cohérence (table de signature de panne) pour $COMP_i$. Une valeur 1 à la $j^{\text{ème}}$ ligne et à la $k^{\text{ème}}$ colonne indique que le résidu r_i est sensible à la $k^{\text{ème}}$ faute. La matrice MC_i est donnée par le tableau 3.2.

3.3.8 Problématique de la localisation de défaillances

Après la détection de l'existence d'une panne dans le système, il va falloir remonter à l'origine de cette faute détectée. Il s'agit de la localisation du composant défectueux dans le processus. C'est l'étape de l'isolation.

A la différence de la détection où un seul résidu est nécessaire, la procédure de localisation nécessite un ensemble de résidus (signatures). Une signature des pannes est directement déterminée à l'aide de la structure des relations de redondance analytique, par conséquent des résidus. Les informations de sensibilités et de robustesse souhaitées pour les résidus sont classées dans une table binaire, appelée table de signatures théoriques des pannes. Cette dernière contient la valeur binaire 1 (resp. 0) lorsque le $i^{\text{ème}}$ résidu est sensible à la $j^{\text{ème}}$ panne.

Une fois la table des signatures théoriques construite, la procédure de détection appliquée à chaque résidu permet d'obtenir la signature réelle des résidus à chaque instant. Pour évaluer le degré d'isolabilité, il suffit de calculer la distance de Hamming D_j par exemple. Il s'agit de calculer la différence entre le vecteur binaire V_b tiré de la table de signatures théoriques et la signature réelle S_j :

$$D_j = |V_b - S_j| \quad (3.31)$$

Les distances entre les signatures reflètent la capacité de localisation entre différentes causes possibles. Pour permettre k erreurs au niveau de la décision (H_0, H_1), il faut que la distance minimale entre deux signatures de pannes soit de $2k + 1$.

Dans le cas d'existence de plusieurs signatures théoriques égale à la signature réelle d'une défaillance, il n'est pas possible de localiser la défaillance, puisque plusieurs d'entre elles ont des signatures identiques: on dit de ces défaillances qu'elles sont non localisables. De même, il existe des signatures de pannes semblables à celles où le système est en bon état de fonctionnement: il s'agit des pannes non détectables. Pour remédier à ce genre de problème, c'est-à-dire pour que les défaillances appartenant à l'ensemble K soient détectables et localisables, il est nécessaire de construire un ensemble de relations de redondance possédant $|K| + 1$ signatures booléennes théoriques différentes.

3.3.9 Procédures de décisions

3.3.9.1 Procédures statistiques de décision

En général, le diagnostic à base de modèle insiste sur la connaissance du comportement des composants et sur la structure du processus à diagnostiquer (la liste des composants

qui le constituent et les connexions entre eux). Sa difficulté réside dans la détermination de la valeur du seuil ε partir de laquelle un résidu est en fonctionnement anormal. Une fois ce test est appliqué sur l'ensemble des résidus r_i , il conduit à un vecteur binaire cohérent $C = [c_1 c_2 \dots c_n]$. Chaque composant c_i de C est obtenu en utilisant la règle suivante:

$$c_i = 1 \quad \text{si} \quad r_i > \varepsilon \quad \text{si non} \quad c_i = 0 \quad (3.32)$$

La structure du résidu est un vecteur binaire V_b qui exprime quelles sont les mesures qui influent sur la valeur du résidu.

$$\begin{cases} V_b(i) = 1 & \text{si le résidu contient la } i^{\text{ème}} \text{ mesure} \\ V_b(i) = 0 & \text{sinon} \end{cases} \quad (3.33)$$

Les procédures de décision que nous allons développer par la suite, sont basées uniquement sur les résidus générés par les RRA. En comparant avec les méthodes de génération de résidus basées sur les observateurs la méthode basée sur les relations de redondance analytique présente quelques caractéristiques intéressantes:

- elle est simple à comprendre,
- les RRA peuvent être générées sous forme symbolique et donc adaptées à une implémentation informatique (réelle).

3.4 Génération de résidus robustes par Bond Graph couplé

Dans cette partie, la contribution consiste à exploiter les propriétés causales, structurelles et fonctionnelles d'un bond graph couplé afin de développer une procédure de génération automatique des indicateurs de fautes robustes pour des processus industriels de nature complexe ou non linéaire. Concrètement, il s'agit de mettre en place une méthode de surveillance à base d'un modèle Bond Graph incertain sous forme LFT pour la détection et la localisation de défauts, figure 3.15.

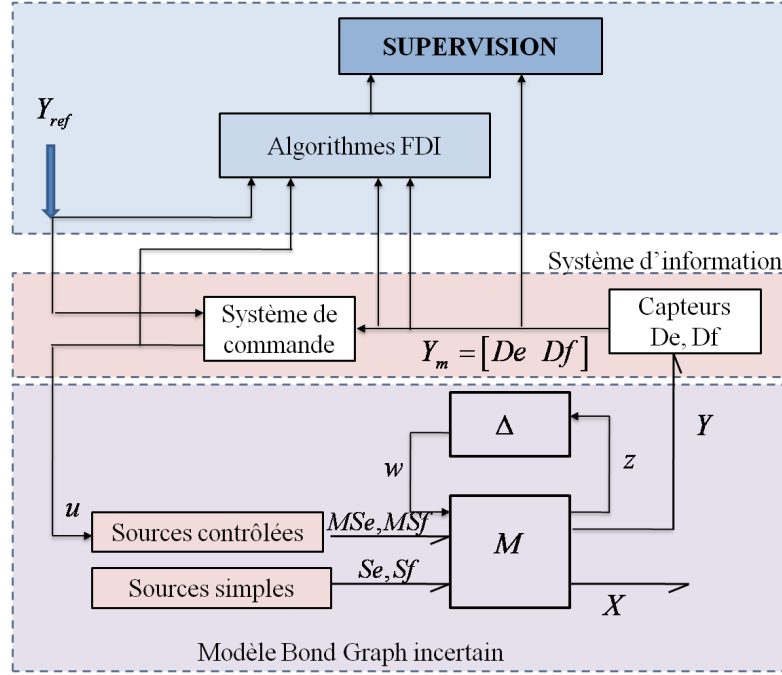


FIG. 3.15 – Représentation bond graph incertain d'un système de surveillance robuste

3.4.1 Forme générale de la RRA incertaine

La génération des relations de redondance analytique robustes à partir d'un modèle bond graph propre, observable et sur-déterminé se résume par les étapes suivantes:

1. La vérification de l'état du couplage sur le modèle bond graph déterministe en causalité dérivée préférentielle; si le système est sur-déterminé, alors poursuivre les étapes suivantes;
2. Le modèle bond graph est mis sous forme LFT;
3. L'expression symbolique de la RRA est déduite à partir des équations aux jonctions.

Cette première forme sera exprimée par:

$$\begin{cases} \sum b_i f_{i_n} + \sum Sf + \sum w_i = 0 & \text{pour une jonction 0} \\ \sum b_i e_{i_n} + \sum Se + \sum w_i = 0 & \text{pour une jonction 1} \end{cases} \quad (3.34)$$

avec $\sum Sf$ la somme des sources de flux liées à la jonction 0, $\sum Se$ la somme des sources de flux liées à la jonction 1, et $b = \pm 1$ suivant que la demi-flèche entre ou sort de la jonction.

Les variables inconnues sont e_{i_n} et f_{i_n} .

4. Les variables inconnues sont éliminées en parcourant les chemins causaux entre les détecteurs ou les sources et les variables inconnues;

5. Après élimination des variables inconnues, les RRAs incertaines sont sous forme:

$$RRA : \Phi \left(\sum Se, \sum Sf, De, Df, \tilde{D}e, \tilde{D}f, \sum w_i, R_n, C_n, I_n, TF_n, GY_n, RS_n, C_n, \mathbb{R}_n \right) = 0 \quad (3.35)$$

où TF_n et GY_n sont respectivement les valeurs nominales des modules des éléments TF et GY . $R_n, C_n, I_n, RS_n, \mathbb{C}_n, \mathbb{R}_n$ sont les valeurs nominales des éléments $R, C, I, RS, \mathbb{C}, \mathbb{R}$. $\sum w_i$ est la somme des entrées modulées correspondant aux incertitudes sur les éléments liés à la jonction.

3.4.2 Génération des seuils adaptatifs

La RRA générée est constituée de deux parties bien séparées grâce à l'utilisation du modèle LFT, une partie nominale noté r :

$$r : \Phi \left(\sum Se, \sum Sf, De, Df, \tilde{D}e, \tilde{D}f, \sum w_i, R_n, C_n, I_n, TF_n, GY_n, RS_n, \mathbb{C}_n, \mathbb{R}_n \right) \quad (3.36)$$

et une partie incertaine noté $b = \sum w_i$ avec :

$$w_i : \Phi \left(De, Df, \tilde{D}e, \tilde{D}f, R_n, C_n, I_n, TF_n, GY_n, RS_n, \mathbb{C}_n, \mathbb{R}_n, \delta_R, \delta_I, \delta_C, \delta_{RS}, \delta_{TF}, \delta_{GY} \right) \quad (3.37)$$

où $\delta_R, \delta_C, \delta_I, \delta_{RS}, \delta_{TF}, \delta_{GY}$ sont respectivement les valeurs des incertitudes multiplicatives sur les éléments $R, C, I, RS, \mathbb{C}, \mathbb{R}$.

La partie incertaine de la RRA sera utilisée pour générer des seuils adaptatifs de fonctionnement normal sous forme d'une enveloppe qui contient le résidu en absence de défauts.

Une incertitude paramétrique peut être définie comme une légère déviation du paramètre de sa valeur nominale, sans aucun effet sur le bon fonctionnement du système. Elle peut être constante ou variable et elle peut varier aléatoirement dans un sens positif comme dans un sens négatif. Compte tenu de cette nature des incertitudes paramétriques, et en utilisant les propriétés de la valeur absolue d'un réel, l'effort (ou le flux) apporté par une incertitude paramétrique peut être bornée en prenant sa valeur absolue.

3.4.3 Exemple

Soit le schéma de la figure 3.16 (a) qui représente le système hydraulique. Le modèle bond graph équivalent est donné par la figure 3.16 (b). Ce système est propre, observable et sur-déterminé.

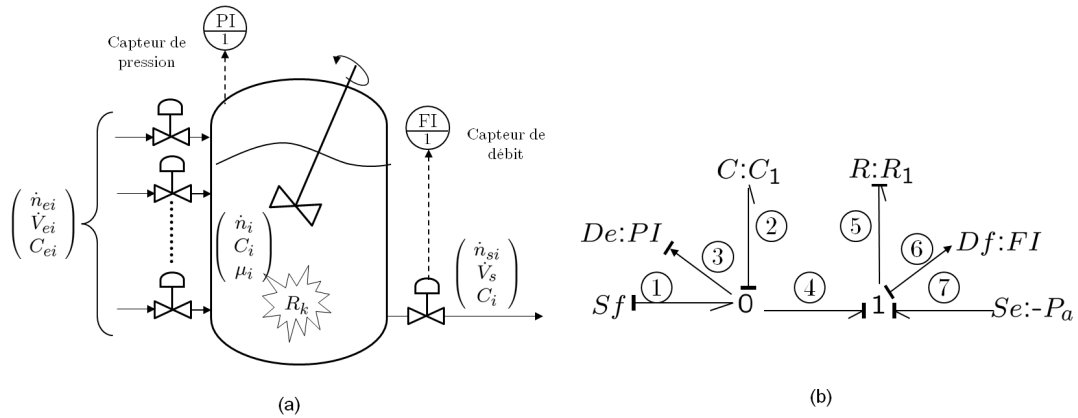


FIG. 3.16 – Schéma du système hydraulique et son modèle bond graph en causalité intégrale

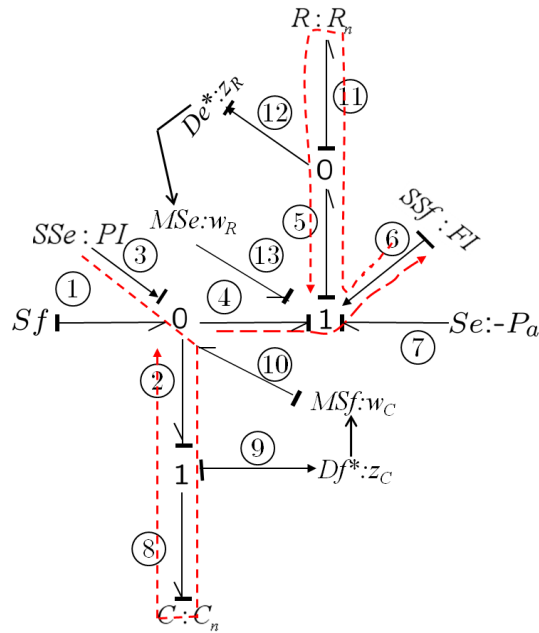


FIG. 3.17 – Modèle bond graph LFT du système en causalité dérivée

Le modèle bond graph LFT du système en causalité dérivée est donné par la figure 3.17, où les sources modulées correspondant aux incertitudes sur les éléments et sont données par les expressions suivantes:

$$\begin{aligned}
 w_R &= -\delta_R z_R; z_R = R_n S S f \\
 w_C &= -\delta_C z_C; z_C = \frac{1}{C_n} \frac{d S S e}{dt}
 \end{aligned}
 \tag{3.38}$$

L'équation du bilan des puissances sur la jonction 0 du modèle bond graph en causalité

dérivée est donnée comme suit:

$$\Phi_{J_0} : Sf - f_2 - f_4 + w_C = 0 \quad (3.39)$$

Les variables Sf et w_C sont des sources de flux connues, et les variables inconnues f_3 et f_4 sont éliminées par le parcours des chemins causaux qui sont montrés en traits pointillés sur le modèle bond graph de la fig. 3.17 et qui sont donnés comme suit:

$$\begin{aligned} f_2 & : SSe \rightarrow e_2 \Big| \xrightarrow{J_0} e_8 \rightarrow \Phi_{C_n}(f_8, \dot{e}_8) \rightarrow f_8 = f_2 \Rightarrow f_2 = C_n \frac{dSSe}{dt} \\ f_4 & : SSf \rightarrow \Phi_{FI}(f_6) \rightarrow f_6 = f_4 \Rightarrow f_4 = FI = SSf \end{aligned}$$

La RRA peut alors s'écrire:

$$\begin{aligned} RRA_1 & = Sf - C_n \frac{dSSe}{dt} - FI + w_C = 0 \\ & = Sf - C_n \frac{dSSe}{dt} - FI - \frac{\delta_C}{C_n} \frac{dSSe}{dt} \\ & = RRA_{1n} + RRA_{1inc} \end{aligned} \quad (3.40)$$

La RRA obtenue est constituée de deux parties parfaitement séparées, permettant ainsi de générer simultanément le résidu et les seuils adaptatifs du résidu

$$\left\{ \begin{array}{l} RRA_n = Sf - C_n \frac{dSSe}{dt} - FI \\ a = |w_C| = \left| \frac{\delta_C}{C_n} \frac{dSSe}{dt} \right| \end{array} \right. \quad (3.41)$$

La deuxième RRA incertaine est obtenue

$$RRA_2 = Se - \frac{FI}{R_n} + PI - |w_R| = RRA_{2n} + RRA_{2inc} \quad (3.42)$$

où $|w_R| = |\delta_R R_n SSf|$

L'aspect adaptatif des seuils est assuré par le fait que les sources modulées $MSe : w_R$ et $MSe : w_C$ sont fonctions des mesures du détecteur dualisé $SSF : FI$ et $SSe : PI$, et ces dernières sont fonctions du mode de fonctionnement du système, ou autrement dit, de l'entrée Sf imposée au système.

L'utilisation des propriétés de la valeur absolue pour générer les seuils de fonctionnement normal assure la robustesse de cet algorithme aux fausses alarmes. Pour maîtriser les non-détections et les retards dans la détection des défauts, nous avons développé une méthode d'analyse de la sensibilité des résidus aux défauts et aux incertitudes, qui permet d'estimer a priori les valeurs détectables des défauts.

3.4.4 Analyse de la sensibilité

La théorie de la sensibilité définit les spécifications de conception de systèmes dynamiques, en particulier les systèmes asservis, pour obtenir une sensibilité de leur comportement minimale (ou dans certains cas maximale) par rapport aux variations des paramètres. Dans le cadre de la surveillance et du diagnostic des systèmes, les variations de paramètres sont assimilées à des défauts qu'il convient de détecter et localiser. Dans ce contexte, la théorie de la sensibilité se présente comme un outil d'analyse et de synthèse efficace pour mettre en évidence les effets des changements de paramètres du système sur son comportement *D. J. Murray-Smith (1986) [152], M. A. Manness & al. (1987) [153] et D. J. Murray-Smith & al. (2003) [154]*.

Plusieurs méthodes de diagnostic robuste à base de modèle ont été développées ces dernières années (*M. Basseville (1998) [115], O. Adrot & al. (1999) [155], A. Johansson & al. (2006) [156] et X. G. Yan & al. (2007) [157]*), qui se résument à la génération et l'évaluation des résidus. L'analyse (temporelle ou fréquentielle) de ces signaux indicateurs de défauts (résidus) permet de détecter et éventuellement d'interpréter tout comportement anormal du système afin de localiser sa provenance. Le moyen d'évaluation de l'intérêt des différents signaux pour la génération de résidus est basé sur le critère de la "sensibilité maximale" par rapport aux défauts.

Il existe différentes façons pour déterminer les fonctions de sensibilité pour les systèmes dynamiques. La contribution apportée par Horowitz est que la définition de fonction de sensibilité qu'il propose est applicable aux systèmes dont les variations des paramètres sont plus larges. Enfin, *W. R. Perkins & al. (1966) [158]* étendent la définition de la fonction de sensibilité de Bode aux systèmes multivariables et aussi dans le domaine temporel (fonction de sensibilité comparative).

En effet, l'algorithme de diagnostic est mis en place après la synthèse de la loi de commande. Les méthodes qui se rapportent à cette approche sont exposées dans *F. Castang (2003) [159]*. Les travaux présentés dans *D. Henry & al. (2006) [138]* et *F. Castang (2003) [159]* concernent la synthèse robuste de filtres DLRD (Détection et Localisation Robuste de Défauts) pour la surveillance à base de modèle des systèmes multivariables et incertains. Ils se fondent sur la modélisation sous forme LFT (Linear Fractional Transformation) qui permet de prendre en compte les incertitudes de modèle, et sur les outils modernes de synthèse et d'analyse robustes (LMI , μ , μ_g et H_1/H_-). Dans le cas où la variation du résidu est supposée normalement distribuée autour d'une moyenne connue, on utilise des méthodes statistiques pour générer des seuils de fonctionnement normal. Après un choix judicieux d'un degré de confiance a priori, il est possible de calculer les probabilités de fausses alarmes et de non-détections *M. Basseville (1998) [115]*.

Enfin, et plus récemment, les auteurs de *C. M. Join & al. (2004) [160]* proposent une

méthode de diagnostic des systèmes bouclés qui repose sur deux techniques : d'une part la technique d'estimation algébrique, qui permet d'obtenir les dérivées de divers ordres d'un signal temporel bruité, et donc une meilleure estimation des paramètres et d'autre part l'utilisation de la notion de platitude pour la synthèse de la commande du système en boucle fermée.

De plus amples informations sur les fonctions de sensibilité peuvent être trouvées dans *M. Eslami (1994)* [161] et *E. Rosenwasser (2000)* [162].

Dans ce travail, l'utilisation d'un modèle bond graph LFT permet de générer automatiquement les résidus et les seuils adaptatifs de fonctionnement normal; ces seuils assurent la robustesse aux incertitudes et s'adaptent automatiquement aux changements des modes de fonctionnement. L'outil bond graph apporte une solution concrète au problème de dépendance paramétrique, car il est possible de suivre la propagation de l'influence des incertitudes en termes d'effort ou de flux à travers tout le modèle grâce aux chemins causaux.

L'analyse de la sensibilité des résidus aux incertitudes et aux défauts dépend de la sensibilité paramétrique absolue et relative de défauts, que nous allons définir et qui permettent de contrôler et d'améliorer les performances du diagnostic. En pratique, la connaissance de la valeur détectable d'un défaut permet de mesurer le risque que ce défaut peut engendrer sur le bon fonctionnement du système et la connaissance des incertitudes qui masquent l'apparition du défaut permet de prendre des mesures supplémentaires afin de maîtriser leurs variations et d'atteindre les performances recherchées.

Soit l'indicateur de faute d'un système dynamique s'écrit sous la forme suivante :

$$\begin{cases} r(f_i, Sf, t, \alpha_{i,n}) = 0 & \text{pour une jonction 0} \\ r(e_i, Se, t, \alpha_{i,n}) = 0 & \text{pour une jonction 1} \end{cases} \quad (3.43)$$

Supposons à présent que les paramètres varient de $\alpha_{i,n}$ à $(1 + \delta_i) \alpha_{i,n}$ où $|\delta_i \alpha_{i,n}| \ll \alpha_{i,n}$ ($\Delta \alpha_i = \delta_i \alpha_{i,n}$) (les barres verticales représentent la valeur absolue). L'expression de résidu après variation correspondante est :

$$\begin{cases} r(f_i, Sf, t, \alpha_{i,n}, \delta_i) = 0 & \text{pour une jonction 0} \\ r(e_i, Se, t, \alpha_{i,n}, \delta_i) = 0 & \text{pour une jonction 1} \end{cases} \quad (3.44)$$

Il existe différentes façons pour définir des quantités qui caractérisent la sensibilité d'un système par rapport aux variations paramétriques. Dans cette section, nous allons définir les fonctions de sensibilité dans le domaine temporel utilisées dans ce projet et appliquer dans le cas d'une surveillance à base d'un modèle Bond Graph.

3.4.4.1 Sensibilité absolue S_a (calcul d'incertitude absolue)

Si l'indicateur de défauts (3.44) dépend d'un vecteur de paramètres de composantes α_i avec $i = 1, \dots, J$, la fonction de sensibilité absolue est définie par rapport aux variations de chaque paramètre i par :

$$S_{a\delta_i} = \sigma_i(t, \alpha_{i,n}) = \frac{\partial r(f_i, Sf, t, \alpha_{i,n}, \delta_i)}{\partial \alpha_{i,n}} \quad (3.45)$$

Si la quantité $\sigma_i(t, \alpha_{i,n})$ dépend uniquement de $\alpha_{i,n}$ elle est dite coefficient de sensibilité. Dans le cas où $\sigma_i(t, \alpha_{i,n})$ dépend en plus du temps, elle est dite fonction de sensibilité. Dans la suite, $\sigma_i(t, \alpha_{i,n})$ est considérée comme une fonction du temps et du vecteur de paramètres nominal $\alpha_{i,n}$.

Chaque variation $\Delta\alpha_i$ du paramètre α_i engendre une variation du résidu. L'écart (ou variation) global d'indicateur de faute induit par le changement des paramètres est donné par :

$$V_r = \Delta r(t, \alpha_{i,n}, \delta_i) = \sum_{i=1}^J \sigma_i(t, \alpha_{i,n}) \Delta\alpha_i \quad (3.46)$$

et l'écart maximum sur le résidu induit par le changement des paramètres vaut :

$$|\Delta r(t, \alpha_{i,n}, \delta_i)| = \sum_{i=1}^J |\sigma_i(t, \alpha_{i,n})| |\Delta\alpha_i| \quad (3.47)$$

Cette quantité est utile pour mesurer l'ampleur de l'influence des changements de paramètres sur le résidu et elle permet aussi de déterminer les seuils qu'il ne faut pas dépasser pour éviter les fausses alarmes. La conception d'un générateur de résidu tient compte d'un degré de performance prenant en compte la signature des défauts, le bruit et les incertitudes) afin de réduire le taux de fausse alarme et de non détection. La décision peut être effectuée à l'aide d'un simple test de seuil, des moyennes mobiles des résidus, ou faire appel à la théorie statistique de décision. L'évaluation des résidus peut être booléenne, son but est d'attribuer un facteur de croyance à un ensemble de défaillances. La combinaison des informations peut être effectuée à l'aide de la théorie de l'évidence ou en utilisant des fonctions floues.

L'analyse de sensibilité du résidu par rapport à une incertitude paramétrique peut se faire en dérivant la RRA par rapport à l'incertitude comme le montrent les équations (3.48) et (3.49). Le résultat est une variable de puissance (effort ou flux), dont l'origine est la partie nominale du paramètre partir de la RRA générée d'une jonction 0 on écrit :

$$S_{a\delta_i} = \frac{\partial r(t, \alpha_{i,n}, \delta_i)}{\partial |\delta_i \alpha_{i,n}|} = \frac{\partial (\sum \alpha_{i,n} f_{i_n} + \sum Sf + \sum \delta_i \alpha_{i,n} f_{i_n})}{\partial |\delta_i \alpha_{i,n}|} = \frac{\partial (\sum \delta_i \alpha_{i,n} f_{i_n})}{\partial |\delta_i \alpha_{i,n}|} = |f_{i_n}| \quad (3.48)$$

A partir de la RRA générée d'une jonction 1, on écrit :

$$S_{a\delta_i} = \frac{\partial r(t, \alpha_{i,n}, \delta_i)}{\partial |\delta_i \alpha_{i,n}|} = \frac{\partial (\sum \alpha_{i,n} e_{i_n} + \sum Se + \sum \delta_i \alpha_{i,n} e_{i_n})}{\partial |\delta_i \alpha_{i,n}|} = \frac{\partial (\sum \delta_i \alpha_{i,n} e_{i_n})}{\partial |\delta_i \alpha_{i,n}|} = |e_{i_n}| \quad (3.49)$$

avec $i \in \{R, C, I, RS, TF, GY\}$. Le produit $\delta_i \alpha_{i,n}$ est l'incertitude multiplicative sur le paramètre i .

Pour mieux illustrer ce résultat, reprenons l'exemple précédent du système hydraulique, dont le modèle BG LFT en causalité dérivée est donné par la Fig. 3.16. L'analyse de la sensibilité du résidu par rapport à l'incertitude $\delta_i \alpha_{i,n}$ peut se faire en dérivant l'expression de la RRA par rapport à l'incertitude $\delta_i \alpha_{i,n}$.

$$S_{a\delta_i} = \frac{\partial r(t, \alpha_{i,n}, \delta_i)}{\partial |\delta_i \alpha_{i,n}|} = \frac{\partial (\delta_R \alpha_{R,n} e_{R_n})}{\partial |\delta_i \alpha_{i,n}|} = \frac{\partial (\delta_R \alpha_{R,n} R_n S S f)}{\partial |\delta_i \alpha_{i,n}|} = |R_n S S f| = |e_{R_n}| \quad (3.50)$$

3.4.4.2 Sensibilité relative S_r (calcul d'incertitude relative)

La fonction de sensibilité la plus utilisée pour évaluer les variations d'un signal par rapport à ses paramètres est la fonction de sensibilité relative (ou logarithmique). Elle est définie par :

$$S_{r\delta_i} = \sigma_i(t, \alpha_{i,n}) = \frac{\partial \ln r(f_i, S f, t, \alpha_{i,n}, \delta_i)}{\partial \ln \alpha_{i,n}} \quad (3.51)$$

Elle est dite fonction de sensibilité relative car elle traduit en effet les variations relatives de la sortie par rapport aux variations relatives des paramètres. Comme précédemment, un écart relatif de la sortie induit par les variations paramétriques peut être calculé comme suit :

$$\frac{\Delta r(t, \alpha_{i,n}, \delta_i)}{r(t, \alpha_{i,n})} = \sum_{i=1}^J \sigma_i(t, \alpha_{i,n}) \frac{\Delta \alpha_i}{\alpha_{i,n}} \quad (3.52)$$

Elle permet de mesurer le taux (ou pourcentage) des variations de la sortie par rapport aux variations des paramètres.

3.5 Exemple illustratif: cas d'emballlement thermique

3.5.1 Phénomène d'emballlement et apparition des réactions secondaires

L'emballlement thermique correspond à la perte du contrôle de la température d'une installation contenant une substance chimique ou un milieu réactionnel. Cette évolution de la température est due à la présence de phénomènes exothermiques, transformations chimiques ou physiques dont la puissance calorifique n'est pas ou plus éliminée par un système de refroidissement *F. Stoessel. (2008) [145]*. En d'autres termes, un emballlement est toujours le résultat d'une élimination de chaleur insuffisante comparée à la production de chaleur. Le bilan thermique d'un réacteur apparaît être l'élément important dans l'évaluation du risque inhérent à une réaction *B. Giovannini (2000) [163]*.

Lors de la mise en œuvre d'un procédé, ce phénomène est susceptible de se produire quand la quantité de chaleur produite au sein du milieu réactionnel est supérieure à la quantité de

chaleur évacuable vers l'extérieur. La production de chaleur au sein d'un milieu réactionnel peut être due à une transformation physique exothermique (cristallisations, mélanges.....) ou chimique. Dans ce dernier cas, le milieu réactionnel peut subir une élévation de température :

- du fait de l'exothermicité d'une réaction chimique (principale ou secondaire, désirée ou non),
- lorsqu'il est composé de substances qui sont portées à une température supérieure à leur température de décomposition.

Cette augmentation de température provoque une accélération de la réaction, qui à son tour, augmente la puissance thermique de la réaction. Dans la mesure où cette dernière augmente exponentiellement avec la température, tandis que la puissance de refroidissement n'augmente que linéairement, la température du milieu réactionnel va croître de plus en plus rapidement : c'est l'emballement de la réaction.

A haute température, cet emballement s'accompagne de l'émission d'une phase gazeuse de plus en plus importante, résultant de la production de gaz de décomposition incondensables et/ou de l'augmentation de la tension de vapeur du mélange réactionnel.

Lorsque la pression atteint la pression de rupture des parties les plus fragiles de l'enceinte contenant le milieu réactionnel (disque de rupture, équipements en verre,...), ces dernières sont susceptibles d'éclater en libérant brutalement une importante quantité d'énergie, ainsi que des produits éventuellement toxiques ou inflammables.

3.5.2 Description synthétique d'emballement thermique

On considère maintenant une réaction exothermique mise en œuvre dans un réacteur. La température du milieu réactionnel, constante durant la marche normale du procédé, est notée T_P . L'arrêt total du refroidissement à un temps t_0 va engendrer une augmentation de la température du milieu jusqu'à atteindre, au temps t_1 , la température maximale de la réaction de synthèse (MTSR). Cette élévation de température est appelée accroissement de température adiabatique ($\Delta T_{ad(R)}$). Dans le cas où la température atteinte est suffisante pour initier une réaction de décomposition exothermique, l'accumulation de chaleur du milieu réactionnel peut provoquer une nouvelle et brutale montée en température ($\Delta T_{ad(D)}$). La figure 3.18 représente ces différentes étapes du scénario d'emballement thermique.

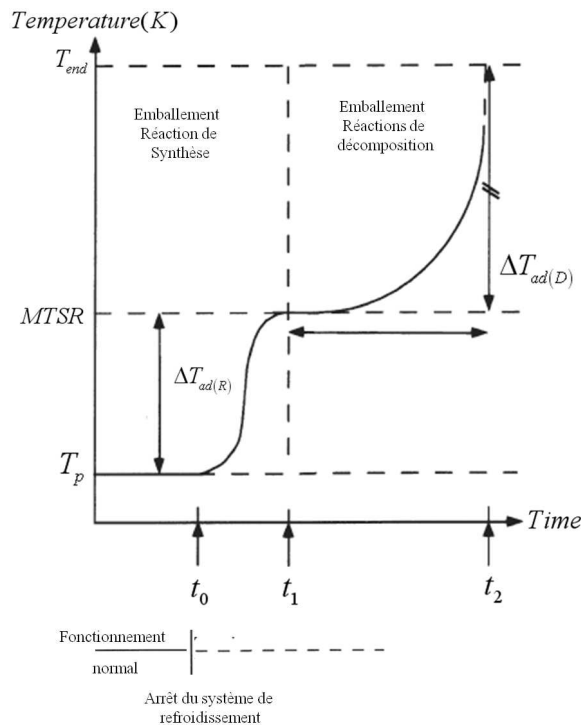


FIG. 3.18 – Représentation schématique d'un scénario de perte totale de refroidissement dans un réacteur fermé discontinu.

3.5.2.1 Réaction de synthèse

Selon *F. Stoessel. (2008)* [145], une réaction de synthèse doit être étudiée au laboratoire à très petite échelle par analyse thermique différentielle, afin de détecter l'existence de réactions secondaires éventuellement présentant une forte exothermicité (décomposition, par exemple). Les quantités de chaleur libérée par diverses réactions possibles, lorsque la température est augmentée, peuvent ainsi être mesurées et l'analyse des résultats permet de calculer globalement une énergie d'activation et une différence de température adiabatique. Cette montée en température maximale correspond à la valeur de la montée en température du milieu en cas de non échange de chaleur avec l'extérieur c'est à dire en cas de refroidissement nul, on parle alors de montée en température adiabatique (appelé aussi différence ou accroissement de température adiabatique). On procède généralement au calcul de la montée en température adiabatique (anglais *adiabatic temperature increase*) afin d'estimer en première approximation le niveau de gravité d'un emballlement de réaction. On utilise pour cela un système adiabatique, où toute l'énergie libérée par la réaction va se retrouver sous forme d'augmentation de température :

$$\text{Augmentation de température} = \text{Energie produite par la réaction}$$

ou

$$C_{pr} \Delta T_{adr} = C_{A,0} V (-\Delta H_r) \quad (3.53)$$

Ainsi, l'expression de l'accroissement de température adiabatique peut être calculée facilement en divisant l'énergie de réaction par la capacité calorifique selon la relation suivante :

$$\Delta T_{adr} = \frac{\dot{Q}_r}{C_{pr}} \quad (3.54)$$

avec: ΔT_{adr} : montée adiabatique de la réaction de synthèse [K],

\dot{Q}_r : énergie de réaction [kJ/kg],

C_{pr} : capacité calorifique de la masse réactionnelle [kJ/(kg.K)],

ΔH_r : enthalpie de la réaction [...].

En connaissant l'enthalpie de réaction, on peut ainsi estimer l'augmentation de température dans un cas adiabatique. La valeur de la montée adiabatique de la température n'est pas seulement importante pour la détermination des niveaux de température dans un équipement industriel au sein duquel des réactions chimiques prévues ou secondaires sont susceptibles de se dérouler mais permet également d'évaluer la dynamique (la rapidité) d'un éventuel emballement. En général, plus la température est élevée plus le risque de voir une réaction secondaire ou de décomposition démarrer est grand et ces réactions dérivées sont des sources de chaleur supplémentaires, on parlera alors d'une explosion thermique.

Dans le cadre d'une analyse de risques, la prédiction du bon déroulement d'une réaction nécessite de connaître les conséquences de la perte de contrôle de la réaction souhaitée. Si une réaction de décomposition non désirée est susceptible d'être amorcée ou déclenchée dans le réacteur, il est important d'estimer la température maximale que la réaction de synthèse (Maximum Temperature Synthesis Reaction (MTSR)) peut atteindre sous conditions adiabatiques.

La température du procédé et le degré d'accumulation des réactifs pouvant varier au cours de la réaction, la température pouvant être atteinte en cas de panne de refroidissement, MTSR, dépend de la conduite de la réaction. La température varie parallèlement en fonction du temps et afin de prédire le comportement du réacteur lors d'une panne de refroidissement, il faut connaître l'instant auquel une panne de refroidissement conduirait à la température la plus élevée. Cette température, notée MTSR, dépend de la température de conduite du procédé, du degré d'accumulation de chaleur au sein du milieu réactionnel et de la valeur de l'élévation adiabatique de température de la réaction de synthèse prévue :

$$MTSR = [T_0(t) + X_{ac} \Delta T_{adr}]_{\max} \quad (3.55)$$

avec: T_0 : température opératoire du procédé [K],

ΔT_{adr} : élévation adiabatique totale de température de la réaction de synthèse prévue [K],

X_{ac} : degré d'accumulation de chaleur au sein du milieu (fraction de la chaleur qui n'a pas encore été dégagée).

Lorsque les températures de travail sont inférieures à la température ambiante, la température maximale de la réaction de synthèse, $MTSR$, sera prise égale à la température ambiante, même si la montée en température adiabatique n'est pas suffisante pour atteindre celle-ci.

Dans le cas d'un scénario majorant, où la conversion initiale est nulle, la température maximale de la réaction de synthèse s'écrit alors :

$$MTSR = T_0(t) - \frac{-\Delta H_r(T)}{C_{pr}} \quad (3.56)$$

Le temps nécessaire pour atteindre l'élévation de température adiabatique ($\Delta T_{ad,r}$) après l'arrêt du refroidissement (temps écoulé entre t_0 et t_1 sur la figure 3.18) est estimé à partir de la cinétique de la réaction de synthèse.

L'estimation de ces deux paramètres (montée en température adiabatique et température maximale de la réaction de synthèse) constitue une étape importante dans l'identification des risques présentés par la mise en œuvre d'une réaction exothermique dans un procédé batch. Ils permettent non seulement de prévoir le déclenchement de réactions de décomposition potentiellement dangereuses mais également d'anticiper une augmentation de pression dans le cas où la température maximale de la réaction de synthèse dépasse la température d'ébullition du milieu réactionnel.

3.5.2.2 Réaction de décomposition

L'enthalpie de décomposition ΔH_d encore appelée chaleur de décomposition correspond à la chaleur dégagée Q_d par la transformation opérée lors de la réaction à pression constante s'exprime selon la relation suivante :

$$\Delta H_d = \dot{Q}_d \quad (3.57)$$

Ainsi, la montée en température adiabatique est :

$$\Delta T_{ad,d} = \frac{\Delta H_d(T)}{C_{pd}} \quad (3.58)$$

avec C_{pd} : capacité calorifique [J/(mol.K)],

Puisque l'enthalpie et la capacité sont proportionnelles pour une même énergie fournie à un contenu de même masse d'un réacteur, un contenu présentant une capacité calorifique faible verra donc sa température s'élever d'avantage qu'un contenu de C_{pd} fort.

Un autre critère pris en considération pour des réactions de décomposition de type Arrhénius et d'ordre zéro, est le temps d'accès à la vitesse maximale de réaction en régime adiabatique (appelé aussi temps disponible jusqu'à la vitesse maximale, le temps critique

d'emballlement,...) (anglais Time to Maximum Rate, TMR) caractérisant la vitesse de montée en température en cas d'incident (temps écoulé entre t_1 et t_2 sur la figure 3.18).

Le temps d'induction de l'explosion thermique est calculé soit à l'aide de la cinétique et de l'enthalpie de la réaction de décomposition ou estimé à partir de l'énergie d'activation et de la puissance de ces réactions à une température donnée et de la chaleur spécifique du milieu.

C'est ainsi qu'afin d'évaluer le risque de décomposition thermique des substances mises en œuvre, il convient de s'intéresser à la cinétique de ce phénomène. Il est possible d'évaluer la probabilité d'occurrence d'une réaction de décomposition en utilisant le concept, basé sur des critères cinétiques, de Time to Maximum Rate dans des conditions adiabatiques représentant le temps d'induction d'une explosion thermique, pour un produit maintenu à une température donnée.

Pour des réactions d'ordre zéro, ou pour des réactions rapides et très exothermiques, ce temps critique, qui correspond au temps mis par la réaction pour atteindre la température critique pour laquelle l'emballlement se produit, s'exprime de la manière suivante :

$$TMR_{ad} = \frac{C_p R (MTSR)^2}{\dot{Q}_d (T = MTSR) E_{a_d}} \quad (3.59)$$

avec : C_p : Capacité calorifique de la réaction (du produit ou du mélange) [J/kg/K],

R : Constante des gaz parfaits [$R = 8.31431$ J/mol/K],

$MTSR$: Température de début de l'emballlement [K],

\dot{Q}_d : Puissance thermique à $MTSR = T_o$ [W/kg],

E_{a_d} : Energie d'activation [J/mol].

Cette relation a été établie pour des réactions d'ordre zéro, mais elle peut aussi être utilisée pour d'autres réactions, tant que l'influence de la concentration sur la vitesse de la réaction peut être négligée. Cette approximation est valable en particulier pour des réactions rapides et très exothermiques.

3.5.3 Génération des Relations de Redondance Analytique

On reprend dans cette partie l'exemple du réacteur étudié dans la dernière partie du chapitre 2. Il est préférable (pour éviter les problèmes numériques d'évaluation des résidus) de générer des RRAs sur un modèle Bond Graph en causalité intégrale lorsque les conditions initiales sont connues, mais dans la majorité des procédés, ces conditions sont inconnues. Nous allons donc dans ce qui suit développer une procédure de surveillance à base de modèles Bond Graph à paramètre incertain en causalité dérivée.

3.5.3.1 Génération des RRAs déterministes

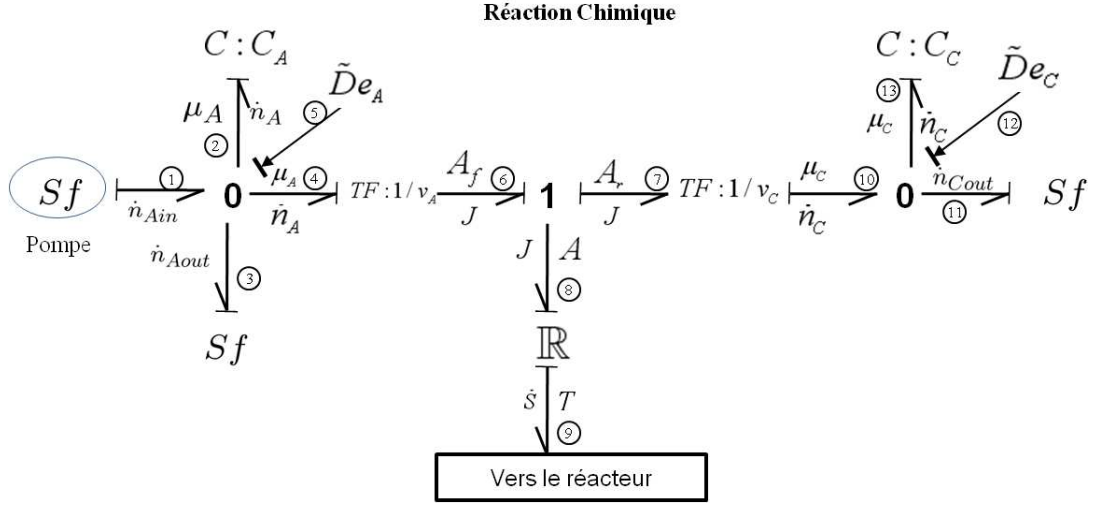


FIG. 3.19 – Modèle BG déterministe en causalité dérivée de la réaction chimique

L'équation du bilan des puissances sur la jonction 0 du modèle bond graph nominal en causalité dérivée est donnée comme suit:

$$RRA_1 = f_1 + f_4 - f_3 - f_2 = 0 \quad (3.60)$$

avec $f_1 = Sf = \dot{n}_{Ain}$, $f_3 = Sf_{out}$, $f_2 = C_A \frac{de_2}{dt}$ et $f_4 = v_A f_6 = v_A J = v_A \Phi(\mathbb{R}, A) = v_A r_f \left(1 - \exp\left(\frac{A}{RT_r}\right)\right) V$

La variable inconnue f_2 est calculée (éliminée) à partir du chemin causal suivant:

$$f_2 \longrightarrow \Phi_{C_A} \longrightarrow e_2 \longrightarrow \tilde{D}e_A : \mu_{A,m}$$

La première RRA, r_1 , déduite de l'équation (3.60), est donnée par

$$\begin{aligned} RRA_1 &= \dot{n}_{Ain} + v_A \Phi(\mathbb{R}, A) - Sf_{out} - C_A \frac{d\tilde{D}e_A}{dt} \\ &= \dot{m}_{in} \frac{C_{Ain}}{\rho_A} + v_A \Phi(n_A, m, H) - \dot{m}_{out} \frac{n_A}{m_m} - \dot{n}_{A,m} \\ &= 0 \end{aligned} \quad (3.61)$$

avec $m_m = \rho V = \rho S L_m$ (S surface de la section du réacteur) et $\dot{n}_{Ain} = \frac{V}{RT_r} \exp\left(\frac{\mu_{A,m} - \mu_A^0}{RT_r}\right) \dot{\mu}_{A,m}$. μ_A^0 est le potentiel chimique standard.

A partir de la deuxième jonction 0, on a

$$RRA_2 = f_{10} - f_{11} - f_{13} = 0 \quad (3.62)$$

avec $f_{11} = Sf_{out}$, $f_{13} = C_C \frac{de_{13}}{dt}$ et $f_{10} = v_C f_7 = v_C J = v_C \Phi(\mathbb{R}, A) = v_C r_f \left(1 - \exp\left(\frac{A}{RT_r}\right)\right) V$

Le chemin causal suivant donne

$$f_{13} \longrightarrow \Phi_{C_C} \longrightarrow e_{13} \longrightarrow \tilde{D}e_C : \mu_{C,m}$$

Ainsi, r_2 peut s'écrire:

$$\begin{aligned} RRA_2 &= v_C \Phi(\mathbb{R}, A) - Sf_{out} - C_C \frac{d\tilde{D}e_C}{dt} \\ &= v_C r_f \left(1 - \exp\left(\frac{A}{RT_r}\right) \right) V - \dot{m}_{out} \frac{n_C}{m_{mé}} - \dot{n}_{C,m} \\ &= 0 \end{aligned} \tag{3.63}$$

Les indicateurs de fautes (r_1 et r_2) sont capables de détecter les dangers liés à l'apparition d'un événement secondaire au cours du déroulement de la réaction de synthèse (déclenchement de la réaction de décomposition, toxicité, inflammabilité... etc). Ensuite, elle permet de déterminer le comportement de la stabilité thermique du milieu réactionnel à partir de l'évolution des résidus en fonction de la température de la réaction T_r .

3.5.3.2 Génération des RRAs robustes

Dans cette section, les indicateurs sont générés pour les systèmes complexes, non linéaires, utilisant l'approche Bond Graph sous la forme de LFT. Le but du diagnostic robuste pour la réaction chimique présentée est de détecter et isoler les défauts chimiques (apparition d'une réaction secondaire ou indésirable... ect) en présence des incertitudes paramétriques. Ces défauts sont produits suite à l'augmentation de la vitesse de réaction et de l'affinité de produit chimique, qui est distinguée des incertitudes de paramètre.

Réaction Chimique

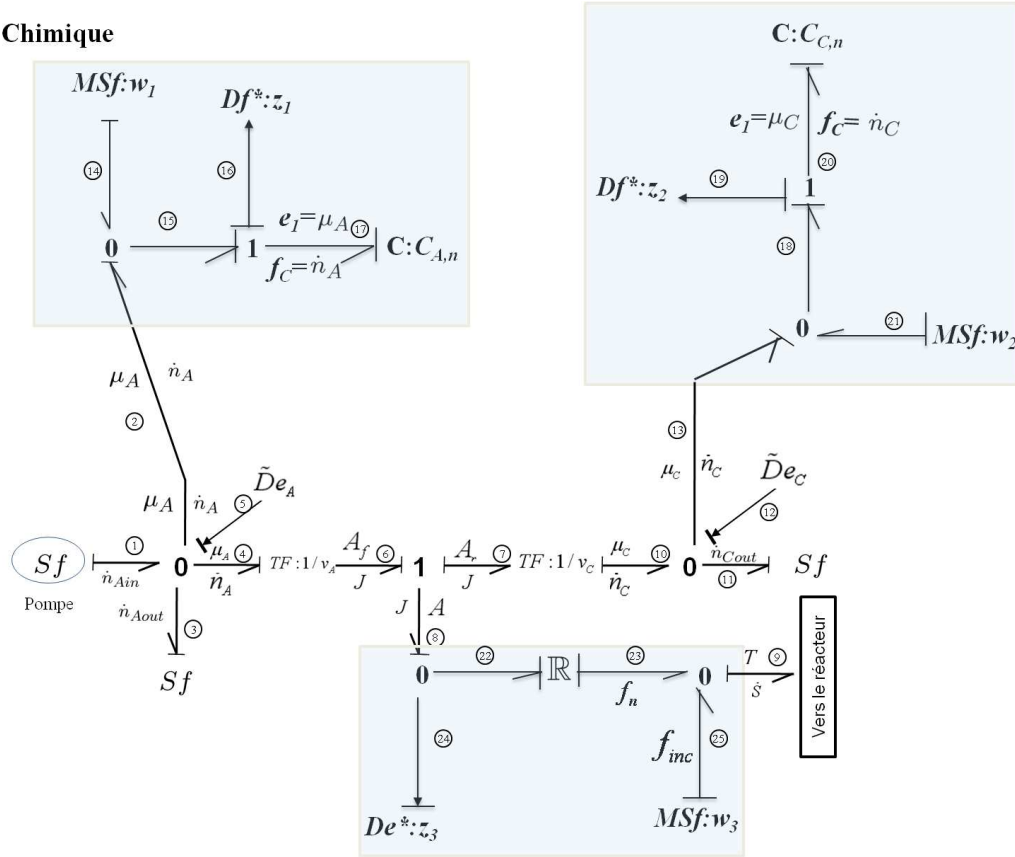


FIG. 3.20 – Modèle BG-LFT en causalité dérivée de la réaction chimique

Lorsque le modèle BG-LFT de la réaction chimique est en causalité dérivée, les entrées $w_i = (i = 1, \dots, 3)$ et les sorties fictives $z_i = (i = 1, \dots, 3)$ sont données par les expressions suivantes

$$\begin{cases} w_1 = -\delta_1 z_1; z_1 = \dot{n}_A = C_A \frac{d\tilde{D}e_A}{dt} = C_A \frac{d\mu_A}{dt} \\ w_2 = -\delta_2 z_2; z_2 = \dot{n}_C = C_C \frac{d\tilde{D}e_C}{dt} = C_C \frac{d\mu_C}{dt} \\ w_3 = -\delta_3 \Phi(\mathbb{R}, A) z_3; z_3 = e_6 = A_f = v_A \mu_A = v_A \left(\mu_A^0 + RT \text{Log} \left(\frac{\int \dot{n}_A dt}{V} \right) \right) \end{cases} \quad (3.64)$$

où δ_1 et δ_2 représentent, respectivement, les incertitudes multiplicatives sur l'accumulation d'énergie de réactif A et de produit C (mène aux incertitudes dans la capacité de chaleur-stockage). δ_3 est l'incertitude multiplicative sur la vitesse de réaction (mène aux incertitudes dans l'énergie d'activation, le facteur pré-exponentiel, l'enthalpie...).

Les RRAs obtenues sont constituées de deux parties parfaitement séparées, permettant ainsi de générer simultanément les résidus et les seuils adaptatifs de chaque résidu.

$$\begin{cases} a_1 = |w_1| + |w_2| + |v_A w_4| \\ a_2 = |w_3| + |v_C w_4| \end{cases} \quad (3.65)$$

L'aspect adaptatif des seuils est assuré par le fait que les sources modulées $MSf : w_1$ et $MSe : w_3$ sont fonctions des mesures des détecteurs dualisés $\tilde{D}e_i : \mu_{i,m}$, et ces dernières sont fonctions du mode de fonctionnement du système chimique.

L'utilisation des propriétés de la valeur absolue pour générer les seuils de fonctionnement normal assure la robustesse de cet algorithme aux fausses alarmes.

Afin d'expliquer le phénomène des réactions secondaires; par exemple, apparition du produit indésirable E qui modifie la dynamique de la réaction de synthèse. Le modèle de la réaction devient :



et par conséquent le bilan de matière et d'énergie ainsi que les indicateurs de défaut seront modifiés. Autrement dit, les RRAs (RRA1 et RRA2) ne prennent pas en compte le terme $v_E \mu_{E,m}$: ces indicateurs ne sont en conséquence pas « nuls ».

Dans notre cas, le réacteur est adiabatique. Le défaut dans le domaine chimique (apparition d'événement secondaire, dégagement d'odeur toxique ou explosif, etc.) liés au phénomène de transformation de matière peut être détecté en l'associant à l'indicateur de fautes (RRA) issue de l'équation de balance des affinités chimiques.

3.5.3.3 Analyse de la surveillabilité

La matrice de signature de défauts est déduite des équations de RRAs générées, où M_b et I_b représentent respectivement l'état de détectabilité et d'isolabilité du défaut sur chaque composant. Ils sont égaux à 1 lorsque le composant est surveillable, et 0 dans le cas contraire.

En se basant sur le vecteur binaire de chaque composant donné par la table 3.3, les lignes ne sont pas fortement différentes. Toutes les fautes peuvent être détectées et non isolées. Par exemple, les signatures du capteur De et de l'apparition d'une réaction secondaire ($Réc.sec$) sont identiques ($S = [1 \ 1]$) ce qui signifie que les défaillances ne sont pas isolables.

L'évaluation numérique des résidus du système de surveillance en ligne nécessite évidemment le calcul des seuils des alarmes. Cette partie fait l'objet du paragraphe suivant.

3.5.3.4 Procédures statistiques de décision

En général, le diagnostic à base de modèle insiste sur la connaissance du comportement des composants et sur la structure du processus à diagnostiquer (la liste des composants qui le constituent et les connexions entre eux). Sa difficulté réside dans la détermination de la valeur du seuil ε à partir de laquelle un résidu est en fonctionnement anormal.

	r_1	r_2	M_b	I_b
Sf_{13}	1	0	1	0
$De : \mu_{A,m}$	1	0	1	0
$De : \mu_{C,m}$	0	1	1	0
$Réac.sec$	1	1	1	0
$De : Lm_1$	1	1	1	0
Sf_{out}	1	0	1	0
Sf_{23}	0	1	1	0

TAB. 3.3 – Signature de fautes

On propose la procédure de décision, $C = \Theta(r_c, r_t, \dots, r_n)$, où chaque résidu, r_i est testé par rapport à un seuil adaptatif calculé à partir des indicateurs correspondants (RRAs) dans le pire scénario (état adiabatique), ces seuils calculés présentent un enveloppe liés à la variation maximale (dans le sens positif et l'autre négatif) de la température dans le cas de l'emballlement d'une réaction (i.e. en utilisant des limites sur l'incertitude).

Le scénario de défaillance de système de refroidissement est suivi de différentes phases ou étapes d'évolution de la situation selon des conditions d'évolution du milieu réactionnel. On propose un algorithme de génération des seuils adaptatifs qui est le suivant :

$$\begin{cases} Si |r_i| < \varepsilon(T_r), & \text{condition normale} \\ Si |r_i| > \varepsilon(T_r), & \text{condition de défaillance} \end{cases}$$

Le cas de défaillance comporte trois possibilités d'évolution de la situation (voir la figure 3.18) et on peut distinguer

$$\begin{cases} Si \varepsilon(T_r) < r_i < \varepsilon(T_r + \Delta T_{ad(R)}), & \text{cas d'emballlement de la réaction désirable} \\ Si \varepsilon(T_r + \Delta T_{ad(R)}) < r_i < \varepsilon(T_r + \Delta T_{ad(R)} + \Delta T_{ad(D)}), & \text{cas d'emballlement} \\ & \text{de la réaction de décomposition} \\ Si $r_i > \varepsilon(T_r + \Delta T_{ad(R)} + \Delta T_{ad(D)})$, & \text{cas de l'explosion thermique} \end{cases}$$

Une fois ce test appliqué sur l'ensemble des résidus r_i , il conduit à un vecteur binaire cohérent $C = [c_1, c_2 \dots c_n]$. Chaque composant c_i de C est obtenu en utilisant la règle suivante:

$$c_i = 1, \text{ si } |r_i| > \varepsilon(j); \text{ sinon, } c_i = 0 \text{ avec } j = \{T_r, T_r + \Delta T_{ad(R)}, T_r + \Delta T_{ad(R)} + \Delta T_{ad(D)}\}$$

3.6 Conclusion

Dans ce chapitre, on a présenté l'intérêt de choisir l'analyse structurelle pour la conception d'un système de surveillance des processus chimiques. Nous avons exposé, les différents types de défaillances qui peuvent affecter les réacteurs chimiques.

Il a été montré l'intérêt d'utiliser l'outil bond graph pour la génération d'indicateurs de fautes sensibles à tout type de fautes. En effet le graphe orienté issu du parcours de chemin causal pour l'élimination des variables inconnus est constitué de sommets représentant les différents éléments bond graph (associés aux composants technologues). De plus la RRA candidate, générée à partir de l'équation de conservation d'énergie (chimique, thermique ou massique), est sensible à des défauts de type phénoménologiques (fuite de matière ou d'énergie, apparition de réactions secondaires,...).

Les incertitudes paramétriques sont modélisées en utilisant les bonds graphs LFT permettant d'associer à chaque élément Bond Graph l'incertitude physique. Le nouveau modèle bond graph incertain (ayant les mêmes propriétés que le bond graph déterministe) est alors utilisé pour la génération de RRA robuste améliorant ainsi l'étape de décision (minimisant les fausses alarmes et non détections). Des exemples pédagogiques de systèmes chimiques ont illustré cette approche.

La méthodologie de génération de RRAs pour les modèles chimiques, le chapitre suivant sera consacré à l'informatisation des ces algorithmes.

Chapitre 4

Informatisation des procédures de génération des algorithmes de surveillance

4.1 Introduction

L'objectif de ce chapitre est l'utilisation des propriétés graphiques des modèles bond graphs pour la conception, sous forme d'une boîte à outils, de modèles dynamiques formels des réactions et des réacteurs chimiques pour automatiser la procédure de construction de modèles et la génération des algorithmes de surveillance. Ce travail est un complément à la boîte à outil FDIPad réalise pour les systèmes thermodynamiques. Nous rajoutons dans cette partie le phénomène de transformation de la matière et une bibliothèque de modèles chimiques (réacteur, réaction chimique, . . .). L'utilisateur a besoin d'un outil graphique performant afin d'apporter des modifications à l'architecture du processus, comme par exemple supprimer ou ajouter des composants ou modifier le placement des capteurs. Cet outil doit donc être rapide dans la génération du modèle, capable de faire abstraction des équations mathématiques souvent compliquées.

Le modèle sera introduit sous forme iconique convivial et compréhensif par l'industriel et un utilisateur néophyte des bonds graphs. Le but est non seulement de générer les modèles et indicateurs de fautes, mais d'analyser conditions de surveillabilité du système chimique et de proposer un placement de capteurs pour le diagnostic des équipements pertinents.

Dans ce chapitre, nous présentons l'outil logiciel développé dans ce travail de thèse pour la génération automatique des indicateurs de faute liés aux réacteurs chimiques. Un exemple pédagogique illustre le fonctionnement de cette boîte à outil.

4.2 État de l'art des logiciels existants

Les simulateurs de procédés chimiques utilisés classiquement dans l'industrie chimique ou para-chimique, peuvent être considérés comme des modèles de connaissance. Ils sont basés sur la résolution de bilans de masse et d'énergie, des équations d'équilibres thermodynamiques, et sont à même de fournir l'information de base pour la conception. Ils sont principalement utilisés pour la conception de nouveaux procédés (dimensionnement d'appareil, analyse du fonctionnement pour différentes conditions opératoires, optimisation), pour l'optimisation de procédés existants et l'évaluation de changements effectués sur les conditions opératoires.

4.2.1 Logiciels de modélisation

Avant même de parler des logiciels pour le diagnostic des systèmes industriels complexes, il faut des modèles pour prédire les propriétés physiques de la matière. C'est pourquoi ces simulateurs disposent tous d'une base de données thermodynamiques contenant les propriétés des corps purs (masse molaire, température d'ébullition sous conditions normales, paramètres des lois de tension de vapeur, ...). Cette base de données est enrichie d'un ensemble de modèles thermodynamiques permettant d'estimer les propriétés des mélanges. Les ingénieurs peuvent à partir de la donnée des corps purs présents dans le procédé et du schéma de procédé, développer un modèle du processus reposant sur la mise en commun des équations décrivant les différentes opérations unitaires, les réactions chimiques, les propriétés des substances et des mélanges, qui puisse aussi communiquer avec d'autres applications comme Excel, Visual Basic, Matlab, ...

Il y a deux modes de fonctionnement dans un simulateur : statique (ou stationnaire) et dynamique. Les simulateurs statiques résolvent des équations statiques qui traduisent le fonctionnement en régime permanent (à l'équilibre), tandis que les simulateurs dynamiques permettent d'évaluer l'évolution des variables dans le temps à partir de la résolution de systèmes d'équations différentielles. Les simulateurs industriels les plus connus mondialement sont :

- Statiques : Aspen Plus (Aspen Technologies), Design II (de WinSim), HYSYS (Hypertech), PRO/II (Simulation Sciences), Prosim *J.T. Chereng & al. (1990)* [164].
- Dynamiques : HYSYS, Aspen Dynamics (Aspen Technologies), Dymosym (Simulation Sciences Inc.).

Les simulateurs dynamiques sont en phase de se substituer aux simulateurs en régime permanent. Néanmoins, tout procédé ne peut être simulé à l'aide de ces simulateurs industriels. En effet, dans le cas de la mise au point de nouveau procédé, il est généralement nécessaire de disposer de son propre simulateur. Le concept est le même : sur la base des propriétés thermodynamiques des corps purs impliqués dans l'opération et des modèles thermodynamiques, il y a résolution des équations de bilan de matière et d'énergie et des relations d'équilibre

constituant le modèle. La différence vient du fait que généralement seules les propriétés des corps présents dans le procédé chimique considéré sont détaillées et que l'environnement de développement est moins convivial. On parlera de simulateur dédié (spécifique à un procédé donné). Il a l'avantage de pouvoir avoir une totale maîtrise sur la façon d'écrire les équations du modèle et de les résoudre.

Un certain nombre de logiciels permettent la génération de modèles en génie des procédés en régime stationnaires *L. T. Westerberg & al. (1985) [165]* et *L. T. Briegler (1989) [166]*. Les modèles dynamiques non linéaires ou linéaires peuvent être simulés numériquement en basant sur les bibliothèques de modèles existants dans le logiciel Matlab-Simulink ou en utilisant le langage Modelica *C. Wollhaf & al. (1996) [167]*.

D'autres produits sont plus spécialisés dans les processus chimiques tel que la boîte à outil de Odysseo (Object oriented Dynamic Simulation Software Environment) du logiciel Prosim *A. Moyses & al. (1999) [168]* qui permet la simulation dynamique de ce type de processus.

Les logiciels à base de l'outil bond graph tel que Symbols 2000 ou 20-Sim sont capables de créer des modèles par une simple interconnexion de sous-modèles graphiques. Ils intègrent tous les deux des bibliothèques de composants hydrauliques et thermiques. On note l'absence d'une bibliothèque pour les procédés chimiques, sauf les travaux de *A.R. Khaled & al. (2006) [128]* qui développe quelques modèles des réacteurs chimiques, mais pas de réactions chimiques.

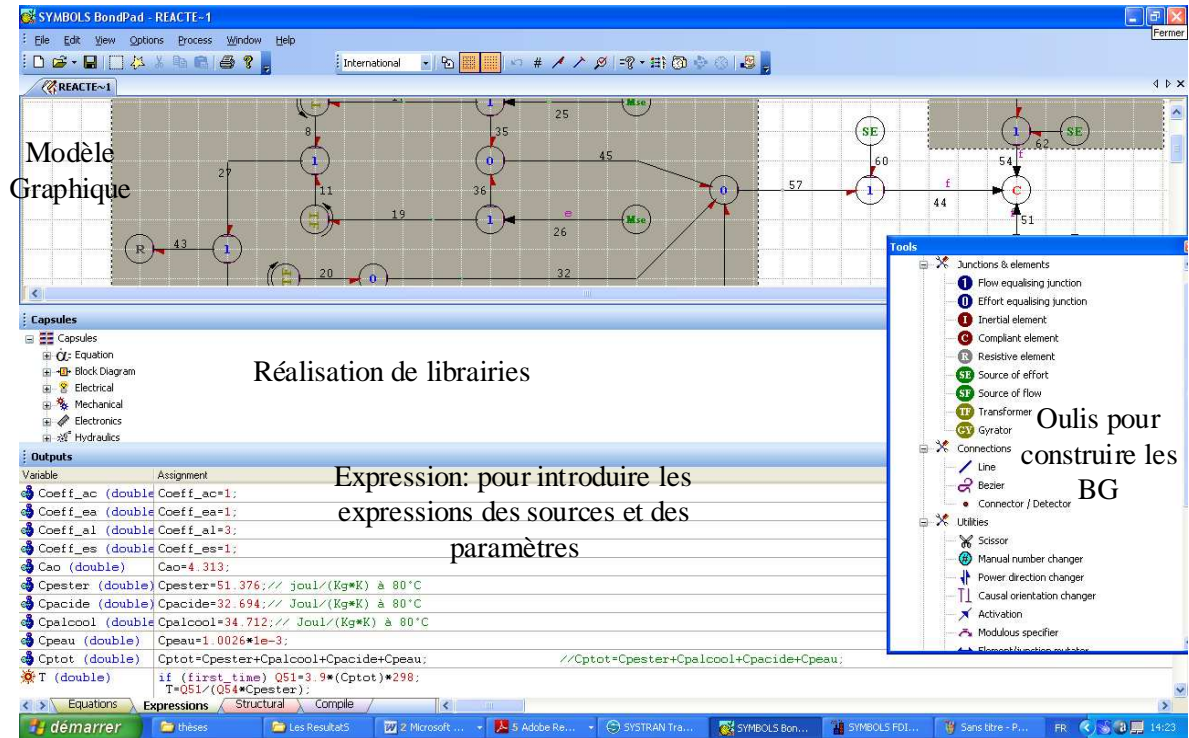


FIG. 4.1 – Interface graphique de la partie BondPad du logiciel SYMBOLS 2000

Un aperçu de plusieurs logiciels de modélisation et de simulation par bond graph tel que ARCHER, CAMP-G, 20-Sim, PASION 32, BondLab, CAMBAS, Dymola, Java Applet for BGs, HybrSim, Modelica, MS1, MTT, Bond graph tool box for Mathematica et SYMBOLS 2000 est donné sur le site <http://www.bondgraphs.com/software.html>. En effet, Amesim d'Imagine est un autre outil de modélisation par bond graph et qui peut être utilisé pour des systèmes en génie des procédés. Un autre outil de modélisation par bond graph, HybrSim, s'avère très efficace pour la modélisation et la simulation des systèmes hybrides. Une particularité des logiciels à base des bond graphs est qu'ils peuvent être utilisés pour la commande des systèmes.

Le logiciel SYMBOLS 2000 (SYstem Modeling by BOnd graph Language and Simulation), développé par A. Mukherjee et A. K. Samantaray, est le fruit de plusieurs années de recherches et d'enseignements à l'Institut Indien de Technologie de *A. Karagpur & al. (2001)* [169]. Son environnement est composé de quatre parties: BondPad (constructeur de modèles graphiques), Simulator (interface de simulation), Controls (outil d'analyse théorique de commande) et FDIPad (constructeur de modèles graphiques pour le FDI) qui a été développé au LAGIS dans le cadre du projet européen CHEM B. *Ould Bouamama & al. (2006)* [3]. Cette boîte à outils concerne les RRAs déterministes. L'interface graphique de SYMBOLS 2000 contient

cinq fenêtres (Tools, Capsules, Equations, Expressions, Structural), elles sont décrites dans la Fig. 4.1.

La procédure de construction d'un modèle sur SYMBOLS 2000 commence par la réalisation d'un modèle acausal, puis les arcs sont numérotés pour faire référence aux efforts et flux qui les traversent. Ensuite, les causalités sont affectées. S'il existe des incohérences dans les relations de causes à effets, un message d'erreur s'affiche sur l'écran, sinon le message indiquera qu'il n'y a aucune erreur et que le modèle est causalement correct. La présence de boucles algébriques est signalée par des "warning". SYMBOLS 2000 propose deux méthodes pour résoudre numériquement les boucles algébriques, et c'est l'utilisateur qui choisit la méthode appropriée à son application en rajoutant par exemple des éléments R ou C avec de très petites valeurs à leur paramètres pour "casser" la boucle algébrique ou différentielle. Une fois les équations générées, les paramètres et les sources modulées par des équations non linéaires sont spécifiées dans la fenêtre "Expressions" avec des notations du langage C++. Sur SYMBOLS 2000 comme sur 20-Sim, le modèle d'un système peut être représenté sous forme d'une interconnection de plusieurs sous-modèles appelés "capsules", qui figurent dans une fenêtre spécifique appelée également Capsules.

4.2.2 Logiciels du diagnostic

En fonction de la méthode utilisée, deux types de logiciels dédiés au diagnostic sont recensés dans la littérature consultée: les logiciels basés sur les méthodes qualitatives et les logiciels basés sur les méthodes quantitatives. Toutefois, il n'existe pas dans la littérature de logiciel permettant la génération de modèles dynamiques sous forme d'équations d'état non linéaires et de RRAs.

Quelques logiciels de génération de RRAs sont consultés dans la littérature :

- **Sa Tool**: *M. Blanke & al. (2001)* [170] est développé dans un environnement Matlab-Simulink. Le logiciel permet de générer les RRAs en introduisant les modèles linéaires sous forme d'état. La méthode est basée principalement sur la manipulation de l'analyse structurale, l'espace de parité et les graphes bipartis pour l'étude de différents couplages.

- **ASCO** "Aide à la Supervision et la Conduite des Opérateurs" est développé par l'IFP, *B.Celse & al. (2000)* [171]. Ce logiciel est basé sur les graphes causaux pour retrouver l'origine et les causes de la défaillance en parcourant le graph.

Les méthodes qualitatives de diagnostic nécessitent des bases de données très riches et évolutives. On cite le logiciel AMandD « Advanced Monitoring and Diagnostic », qui est basé sur les réseaux de neurones flous et les méthodes heuristiques *J. M. Koscielny & al. (2006)* [172].

Dans le cadre du projet CHEM pour la supervision des processus chimiques et pétrochimique, les travaux de *B. Ould Bouamama (2002)* [16] ont implémenté la méthodologie de

génération de modèles et de RRAs pour le diagnostic des processus thermo-fluides.

L'architecture globale du système est donnée par la figure 4.2.

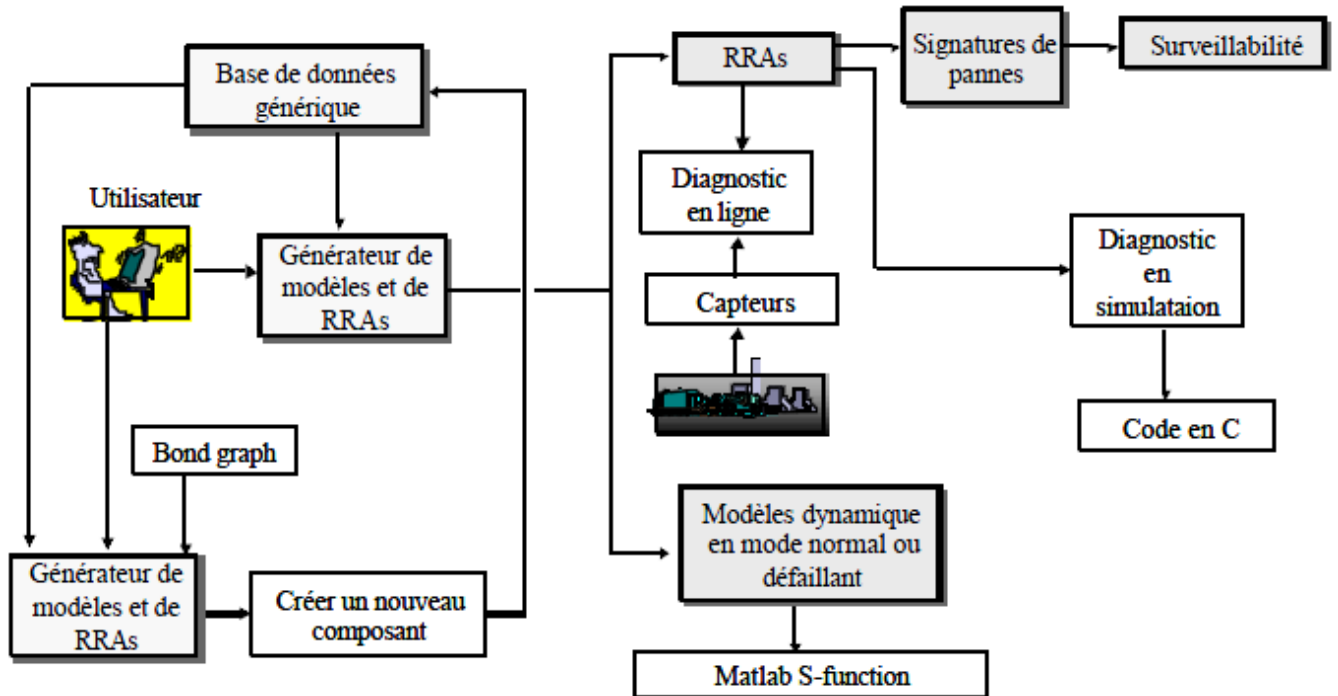


FIG. 4.2 – Architecture du générateur de modèles en génie des procédés pour leur diagnostic

Sur la base du Plan d'Instrumentation Détaillé, le modèle architectural est réalisé en connectant les différents composants en respectant des règles de connections basées sur une approche fonctionnelle développée par *C.Feliot.(1997)* dans [173]. La base de données contient trois classes : classe de processus (formée sous forme de composant générique vanne, conduite, chaudière etc..), classe de contrôleurs (régulateur PID, tout ou rien, ..) et une classe de capteurs (détecteurs d'effort, i.e. température, pression,..et détecteurs de flux (débit)).

Le modèle dynamique (sous forme d'équations d'état modélisant l'énergie thermique, hydraulique et chimique) ainsi que les RRAs sont alors générés sous forme symbolique. L'analyse structurelle du modèle global permet alors d'obtenir la surveillabilité du processus (donnée par le tableau de signature des fautes) sur la base de l'instrumentation utilisée. Ceci permet alors à l'opérateur d'une façon graphique de placer convenablement les capteurs pour satisfaire le cahier des charges fixés.

Pour l'implémentation de ces procédures, une boîte à outil est développée dans le logiciel SYMBOLS-2000 [174] dont l'interface graphique est donnée (Fig. 4.3).

Un des inconvénients des logiciels (traitant de l'outil bond graphs) cités ci-dessus est qu'ils sont conçus pour répondre aux besoins de simulation. Les expressions mathématiques du

modèle global sont alors obtenues en liant les équations des sous-modèles correspondants des composants physiques. Du point de vue bond graph, les variables associées aux ports d'entrée et de sortie au point d'interconnexion de deux composants sont mises à égalité pour construire le modèle dynamique global. On parle d'une modélisation à causalité fixe qui convient mieux à la simulation.

Cependant, pour la surveillance des processus, on préfère une causalité flexible. Cette flexibilité permet d'avoir plusieurs couplages possibles entre les variables et facilite l'élimination des variables inconnues. Dans ce cas, les sous-modèles doivent être représentés sous forme d'équations acausales. Toutefois, il est difficile de lier des modèles acausaux dans une interface graphique à cause des difficultés pour formuler les règles d'interconnexion entre objets.

4.3 Implémentation de la boîte à outils

Pour constituer la bibliothèque de modèles, on a utilisé la technique dite des "capsules" une fonctionnalité développée dans "Symbols 2000" pour créer les sous-modèles (objets) des différents composants des systèmes en génie des procédés. Dans Symbols 2003, il existe déjà une bibliothèque de sous-modèles pour plusieurs composants physiques (mécaniques, électriques, thermiques, hydrauliques), les représentations sous forme de blocs diagrammes, les éléments logiques, les capteurs, etc développé par l'équipe "MOCIS" du LAGIS. Dans notre boîte à outils, nous avons ajouté les principaux composants des réacteurs chimiques homogènes (les réacteurs continus, les réacteurs fermés, les réacteurs semi fermés, ...) et des réactions chimiques (phénomène de transformation) lors de l'apparition des réactions secondaires (réactions successives, réactions en parallèles, réactions en chaînes linéaires, réactions en chaînes ramifiées).

Cette architecture formelle des réactions en chaînes ramifiées facilite le diagnostic des réactions exothermiques qui provoquent toujours le risque d'emballement thermique, et permet le placement de capteurs pour améliorer la surveillabilité du système.

Les capsules consistent à mettre le modèle bond graph générique sous forme d'un objet à ports ouverts qui peut être connecté ou non à d'autres composants en fonction du type d'élément à associer. A titre d'exemple, un port peut être optionnel (un port pour connecter un détecteur). Les éléments dynamiques I et C sont mis en causalité préférentielles dérivées alors que les autres éléments (R, TF, GY) ont une causalité générique.

4.3.1 Conception des bibliothèques de modèles pour les composantes chimiques

Les capsules des réacteurs chimiques englobent le modèle bond graph du domaine chimique (réactions chimiques) constitué des modèles de la cinétique et de la stœchiométrie de réaction.

Ces capsules de réactions peuvent être utilisées pour l'étude du phénomène de transformation de la matière uniquement. Ces capsules apparaissent avec une icône "metier" (fig. 4.3) mais en cliquant sur ces icônes, le modèle détaillé Bond Graph est affiché (fig. 4.4).

La bibliothèque des réactions chimiques comporte des capsules :

- des réactions simples réversibles et irréversibles près de l'équilibre ;
- des réactions réversibles simples et irréversibles loin de l'équilibre (si on est loin de l'équilibre, la relation de la vitesse de réaction est plus complexe et dépend des affinités directs et inverses séparément, alors, l'élément résistif (monoport) est remplacé par un multiport) ;
- des exemples des réactions complexes (par stade, présentant des chaînes linéaires ou ramifiées près ou loin de l'équilibre).

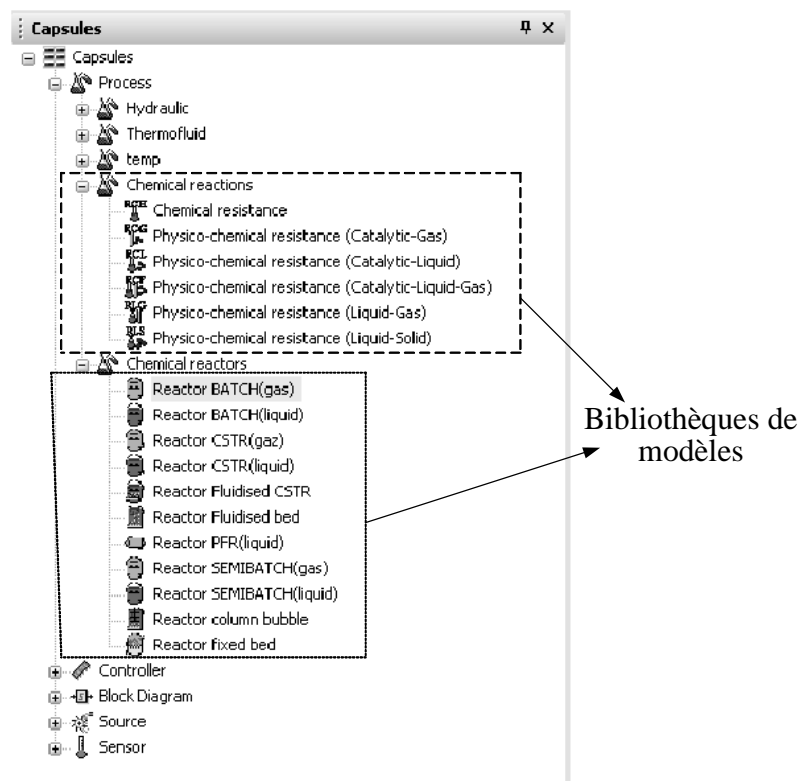


FIG. 4.3 – Bibliothèque de capsules des réacteurs et des réactions chimiques

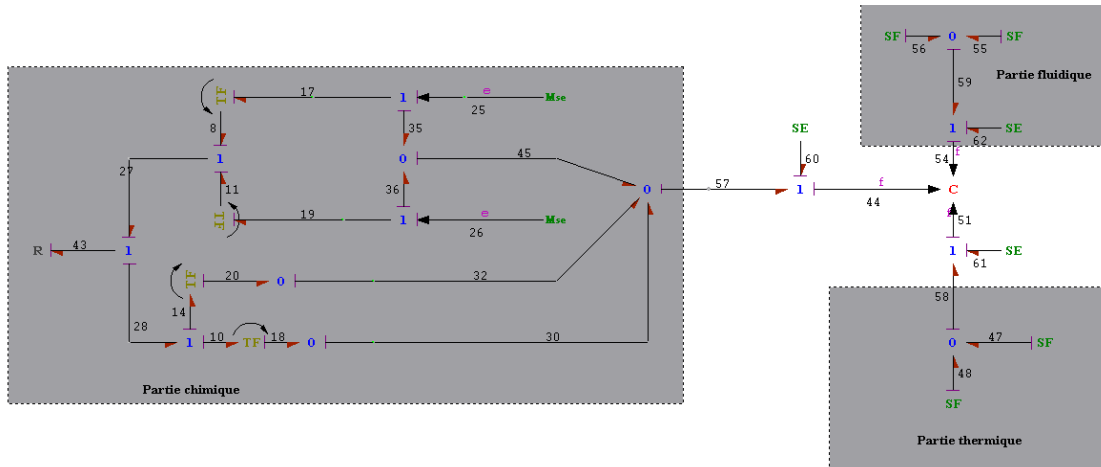


FIG. 4.4 – Modèle interne de la capsule d'une réaction chimique

4.4 Conclusion

Un état de l'art sur les logiciels de modélisation et de diagnostic a été présenté. *SYMBOLS 2003* est le logiciel le plus adapté à la modélisation des réacteurs chimiques, car il offre la possibilité de définir des variables internes comme des variables globales. Ce chapitre montre aussi la possibilité d'adapter l'interface *FDI Pad* conçue initialement pour les modèles déterministes monoénergie et thermofluidique aux systèmes chimiques, et par conséquent, de générer des RRAs robustes. Il suffit de créer une bibliothèque de modèles chimiques représentés par des composants technologiques. L'utilisateur pourra ainsi sélectionner, à partir d'une bibliothèque les composants pour construire le modèle dynamique bond graph de son système à partir d'un simple P&ID, faire de l'analyse structurelle pour la surveillance et proposer un placement de capteurs adéquat afin de satisfaire le cahier des charges.

Dans ce chapitre, on a présenté l'intérêt de choisir l'approche LFT-BG pour la conception d'un système de surveillance robuste pour le cas des processus chimiques à paramètres incertains. Le modèle incertain global est généré par simple connexion de plusieurs sous-systèmes (capsules). Les RRAs incertaines sont ensuite générées sous forme symbolique. Une matrice de signature des défauts peut être alors produite sur la base d'un cahier de charge que l'utilisateur peut fixer.

Chapitre 5

Application à une installation d'estérification

5.1 Introduction

Cette application concerne un système décrit par des modèles bond graphs couplés caractérisés par la mise en œuvre de trois énergies : chimique, thermique et fluide. Cette application a été choisie pour montrer l'extension des algorithmes développés à des modèles non linéaires et décrits par des multiports présents dans les procédés chimiques.

5.2 Etude de l'installation chimique

L'installation pilote *UPR 1200* est une unité d'estérification, destinée à étudier des réactions minérales et organiques en mode discontinu sous pression atmosphérique et sous vide, Fig. 5.1. Elle comporte un réacteur parfaitement agité de type batch (qui peut fonctionner en mode continu), un agitateur, une colonne de distillation, un condenseur, un décanteur azéotropique, un groupe thermorégulateur, un système d'alimentation (ampoule de coulée), un circuit d'eau de refroidissement et un circuit de vide. Les composants sont dénotés respectivement par les lettres minuscules de (a) à (h) sur la figure 5.2



FIG. 5.1 – Vue générale de l'installation chimique

Cette unité est commandée soit en mode local à partir d'un coffret de commande, soit à partir d'un PC connecté à l'unité en mode bus. Elle dispose d'un ensemble des capteurs (de débit et de température) pour soulever les différentes mesures afin de les exploiter pour l'étude de la réaction et/ou la supervision.

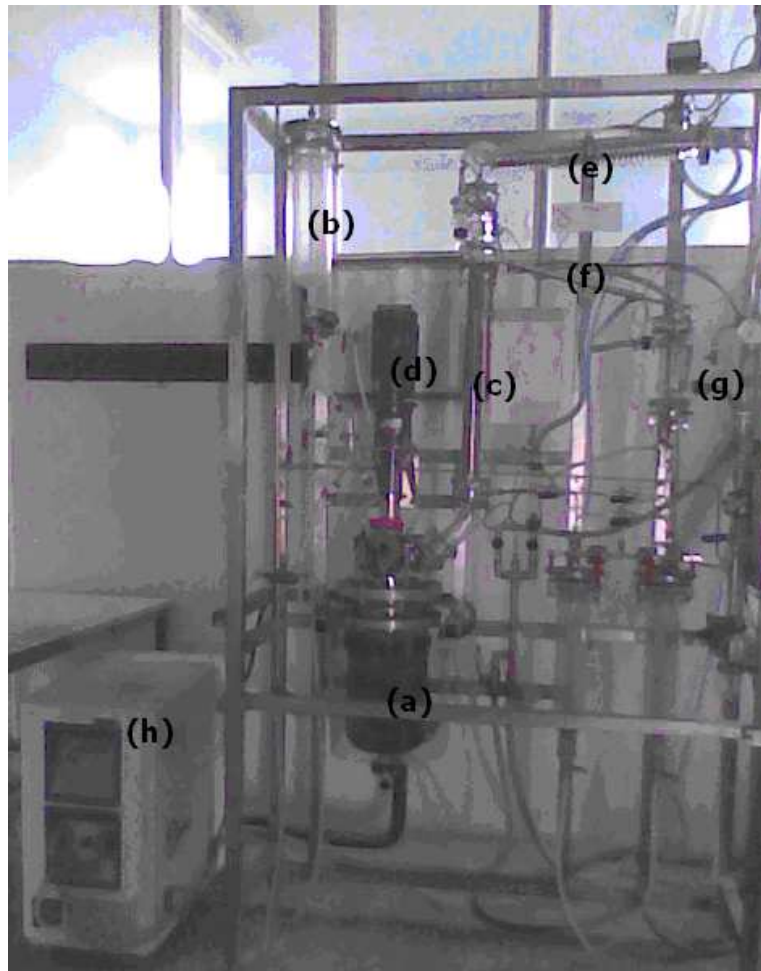


FIG. 5.2 – Vue générale de l'installation chimique

Dans cette application, on s'intéresse uniquement à une partie de l'installation, constituée principalement d'un réacteur chimique d'une capacité de 10 litres, régulé par un groupe thermostateur d'une puissance de 6 *KW*, d'un circuit d'eau et d'un système d'alimentation (ou de recharge) du réacteur. Le plan des instruments détaillés (P&ID) de la partie étudiée de l'installation est donné dans [175]).

5.2.1 Fonctionnement de l'unité

On introduit le mélange préparé au laboratoire dans le réacteur par le biais du couvercle et de la trappe de chargement. Notre réaction, étant une réaction d'estérification, est faiblement exothermique; et afin de maintenir la température du milieu réactionnel constante, un fluide liquide (huile) caloporteur circule entre les deux enveloppes de verre du réacteur, sa température est contrôlée par le groupe thermostateur assurant les échanges thermiques

convenables permettant de fixer la température interne du système.

Après l'aboutissement de la réaction, et à la sortie du réacteur, la fraction évaporée du mélange passe par la colonne à garnissage où s'effectue sa distillation. Le résidu revient au réacteur, alors que le distillat, phase légère, sera condensé par une circulation d'eau froide moyennant un serpentin qui traverse le condenseur. Une partie de ce distillat va sortir en mélange azéotropique, la séparation de ce type de solutions par distillation demeure impossible. Pour réaliser cette tâche, les produits sont envoyés vers le décanteur azéotropique où il y aura séparation des deux phases lourde et légère, récupérées dans deux ampoules voisines. Ces deux phases ne sont autres que l'acétate d'éthyle et l'eau, produits de notre réaction d'estérification.

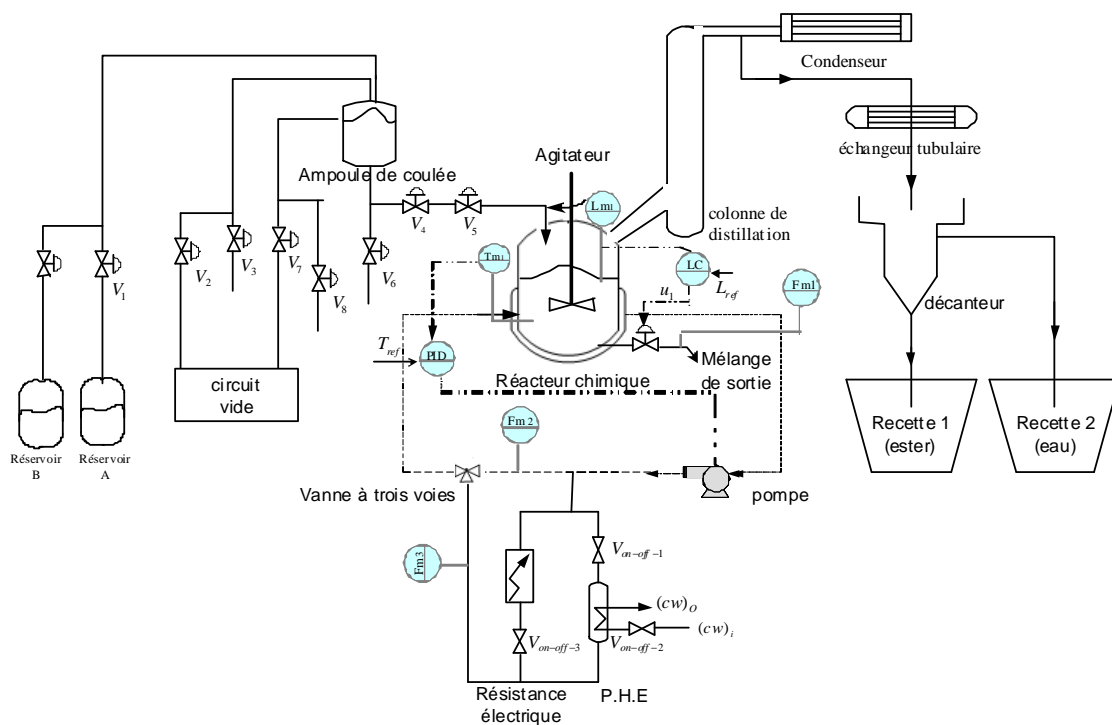
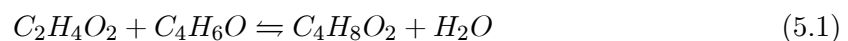


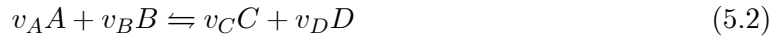
FIG. 5.3 – Schéma technologique de l'unité d'estérification

5.2.2 Description de dispositifs

Le système à modéliser dans un but de surveillance, est un réacteur chimique continu avec un circuit de refroidissement, Fig. 5.4. Le système réactif contient une réaction réversible exothermique entre l'acide acétique et l'éthanol, supposée en équilibre local, où la température et la pression sont uniformes dans toute la substance. Cette réaction est définie comme suit *Henry et al. (2000)* [125].



Cette réaction peut être écrite sous la forme générale suivante



avec ν_i sont les coefficients stœchiométriques. Dans notre cas, ces coefficients sont égaux à un. A_f et A_r sont les affinités chimiques directe (*forward*) et inverse (*reverse*).

Dans ce mode de fonctionnement, le réacteur étudié travaille en continu, c'est-à-dire qu'il est alimenté par les réactifs, et que les produits de la réaction sont soutirés de manière parallèle.

Le schéma technologique du processus est donné par la figure 6.4. Deux réservoirs contenant les réactifs (A , B) assurent l'alimentation du réacteur à travers deux vannes réglées manuellement (débits volumiques \dot{V}_A et \dot{V}_B). Le mélange du produit obtenu (C , D) est fourni au consommateur via une servo-vanne commandée à une position u_1 pour maintenir le volume V de mélange constant dans le réacteur.

Durant la réaction, la température du milieu réactionnel est maintenue à sa valeur désirée (de référence) T_{ref} par ajustement de la température à l'aide de la circulation de réfrigérant.

Le refroidissement est effectué à partir d'un système de refroidissement alimenté d'un robinet d'eau. Pendant que le fluide circule par le système de refroidissement, il diminue sa teneur en énergie, et puis pénètre dans la double enveloppe entourant le milieu réactionnel. Le fluide est refoulé vers le système de refroidissement par une pompe à débit constant pour accomplir un circuit fermé sans interruption diminuant ainsi la chaleur de la réaction d'estérification.

Le niveau du mélange L_r et la température T_r dans le réacteur, indiqués respectivement par les capteurs d'effort L_{m1} et T_{m1} , sont réglés par les contrôleurs LC (Level Control) et PID (Proportional Integral Derived). Ils agissent sur le débit massique de la vanne de sortie (sortie du produit vers le consommateur) indiqué par le capteur F_{m1} et sur le débit de la pompe mesuré par le capteur F_{m2} . La valeur du signal de commande de chaque contrôleur est considérée connue. En plus de ceci, il y a également un capteur de flux pour déterminer la vitesse globale d'évolution de la réaction. Il faut noter que ce capteur est fictif, la mesure de la vitesse chimique est reconstituée par un observateur ou par un algorithme à base de méthodes qualitatives (réseaux de neurones, logiques floues...etc).

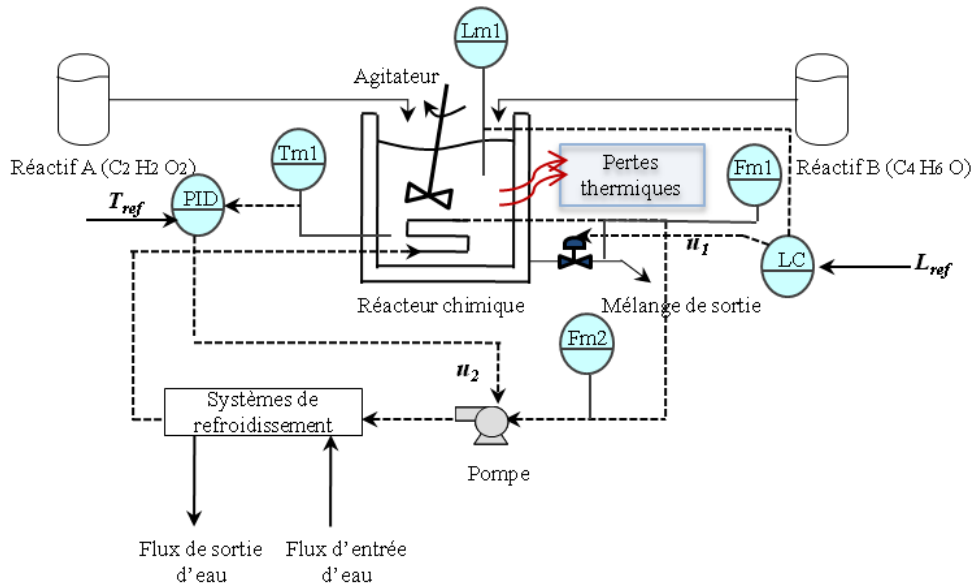


FIG. 5.4 – Schéma technologique de la partie étudiée de l'unité d'estérification

5.2.3 Aspect thermodynamique et cinétique de la réaction

La formation d'ester peut se faire par plusieurs réactions chimiques, on va s'intéresser dans ce chapitre à la formation d'Ester par un mélange d'Acide plus l'Alcool.



La réaction d'estérification conduit à un état d'équilibre où les concentrations des quatre espèces ne varient plus. La quantité d'ester formée à l'équilibre dépend essentiellement de la classe de l'alcool. Il faut noter que la réaction d'estérification est généralement lente et, dans certains cas, l'état d'équilibre n'est atteint qu'au bout de plusieurs jours à la température ordinaire. Elle nécessite la présence d'un catalyseur.

A son état d'équilibre la réaction est définie par sa constante d'équilibre

$$K = [R - COOR'] \cdot [H_2O] / [R - COOH] \cdot [OH] \quad (5.4)$$

Pour un mélange équimolaire d'acide et d'alcool, la limite d'estérification, c'est-à-dire la proportion d'ester formé dépend surtout de la classe de l'alcool, elle est d'environ :

- 0,67 mole avec un alcool primaire ;
- 0,60 mole avec un alcool secondaire ;
- 0,05 mole avec un alcool tertiaire.

La modification de température ne déplace pas l'équilibre car la réaction est pratiquement athermique ($\Delta H = 0$). Pour le déplacer, il faut ajouter un excès d'acide ou d'alcool, ou distiller

l'ester lorsqu'il est très volatile ou bien utiliser la méthode d'élimination de l'eau avec une distillation azéotropique.

Pour la vitesse de la réaction, elle dépend principalement de la classe de l'alcool, la température de milieu réactionnel et de la présence d'un catalyseur acide [122].

5.2.4 Problématique

Malgré le nombre impressionnant de publications sur la modélisation des réacteurs chimiques (une recherche bibliographique détaillée est présentée dans le premier chapitre de cette thèse), jusqu'à l'heure actuelle, le problème de la modélisation des réacteurs chimiques présents dans l'industrie reste une question de recherche ouverte. La présence de plusieurs type d'énergie (chimique, thermique, hydraulique, mécanique, électrique, électrochimique. . .) explique le comportement non linéaire du réacteur chimique. Ce comportement est dû principalement au couplage non linéaire de différents phénomènes de natures diverses (apparition des nouveaux produits, réaction chimique, échange thermique, écoulement du fluide dans les conduites, pompes, vannes, agitateur, réaction d'oxydation), aux phénomènes physicochimiques, introduisant des dynamiques d'instabilité thermique et cinétique incontrôlables de la dynamique du milieu réactionnel et aux différentes configurations de modélisation (monophasique ou phases séparées).

Les modèles des réacteurs chimiques se différencient principalement par les hypothèses posées, les équations employées, les méthodes de résolution et les moyens de calcul. On distingue les réacteurs à paramètres localisés représentés par des équations différentielles ordinaires (EDO) tel que : les réactions continus, les réacteurs fermés, les réacteurs semi-fermés. . . ect, les réacteurs à paramètres distribués représentés par les équations différentielles à dérivées partielles (EDP) tels que les réacteurs tubulaires. Dans la littérature, ces modèles sont classés en trois catégories principales:

- Modèles linéaires: Les équations sont linéarisées autour d'un point de fonctionnement, et le système est décrit par un ensemble de fonctions de transfert interconnectées. Les avantages de ces modèles résident dans la souplesse des calculs et le nombre de méthodes d'analyse disponibles (observateurs linéaires, observateurs non linéaires, espace de parité, . . . ect).

- Modèles non linéaires : L'étude d'un système chimique dans le cas d'une approche conventionnelle, introduit un modèle constitué d'un ensemble d'équations aux dérivées partielles (EDP) dont l'établissement et la résolution numérique est très complexe. Ce type de modèle est utile pour le dimensionnement, l'analyse de l'évolution de vitesse du milieu réactionnel fluide, la distribution de la température dans l'espace . . . etc. Mais, ces modèles ne permettent pas une synthèse directe des régulateurs et nécessite un grand volume de calcul. Dans les installations de plus petites dimensions, le modèle non linéaire peut être considéré à paramètres localisés : le système est alors décrit par un ensemble d'équations différentielles et algèbro-

différentielles. On s'intéresse dans le cas d'une approche bond graph à un modèle global phénoménologique mettant en évidence la dynamique des phénomènes de stockage, de dissipation et de transport d'énergie en considérant le modèle à paramètres localisés. Il est évident que l'approche système d'équations aux dérivées partielles est quelquefois utilisée pour être intégrée dans les lois constitutives du modèle bond graph.

D'une part, les modèles à paramètres localisés sont utilisés dans le monde industriel pour la simulation et la connaissance de la dynamique des réacteurs. D'autre part, les modèles à équations aux dérivées partielles, malgré leur complexité, représentent assez bien la connaissance physique des micro-phénomènes présents dans les centrales. Cependant, ceux qui existaient jusqu'à présent étaient peu adaptés aux systèmes de commande car n'étant pas élaborés sous forme d'entrée/sortie.

- Modèles calculant l'évolution d'espèces chimiques : la dynamique de la réaction (du milieu réactionnel) joue un rôle important dans la modélisation des réacteurs chimiques en raison du phénomène de transformation chimique et électrochimique. Celui-ci est dû à la nature des réactifs et aux changements des phases.

Il introduit alors pour le niveau un déphasage non minimal très nuisible à la stabilité du système. La dynamique de ces deux phénomènes est identifiée par des réponses à déphasage non minimal.

Dans *A.R. Khaled & al. (2006)* [128], un modèle physique non linéaire de ces phénomènes a été obtenu par une approche bond graph. Le type de la réaction de synthèse (estérification) de notre installation ne mettent pas en évidence les phénomènes de diffusion et électrochimique, électrique. C'est pourquoi il ne sera pas modélisé. Il faut noter aussi que nous sommes en présence d'un mélange monophasique et qu'en réalité la séparation entre les phases vapeur et liquide au cours de la réaction n'est pas aussi nette. Ce phénomène introduit les difficultés de mesures bien connues des industriels.

D'autres phénomènes liés à la stabilité thermiques et cinétiques dans les réacteurs chimiques sont traités dans l'ouvrage de *J. Thoma & al (2000)* [126].

5.3 Modélisation du réacteur chimique

5.3.1 Bond graph à mots du système

5.3.1.1 Hypothèses de modélisation

Pour établir le modèle bond graph certaines hypothèses sont considérées comme suit :

- le réacteur est parfaitement agité de sorte que la température et les concentrations de différentes espèces chimiques soient homogènes dans tout le mélange de la réaction,
- le mélange de la réaction se compose d'une phase liquide homogène, et aucun changement de phase n'est considéré,

- la pression et le volume du liquide dans le réservoir sont constants,
- l'effet du caloporteur est partiellement modélisé comme transfert de chaleur,
- le réacteur a une mauvaise isolation thermique: il y a une perte thermique vers l'environnement,
- les deux constituants purs sont injectés séparément à l'entrée.

5.3.1.2 Variables de puissance utilisés

Le système est caractérisé par un couplage de trois énergies: chimique, thermique et hydraulique. Les variables de puissance utilisées pour représenter le système sont basées sur la modélisation en pseudo bond graph. La partie hydraulique est caractérisée par la paire pression-débit massique (P, \dot{m}) , tandis que la partie thermodynamique est représentée par la paire (T, \dot{H}) , décrivant le phénomène de convection (matière en mouvement), et la paire (T, \dot{Q}) représentant le phénomène de conduction (stationnarité de la matière).

Pour le domaine chimique, le couple potentiel chimique-flux molaire (μ, \dot{n}) et le paire de l'affinité chimique et la vitesse de la réaction (A, J) sont utilisés pour modéliser respectivement la transformation chimique et le phénomène cinétique de la réaction.

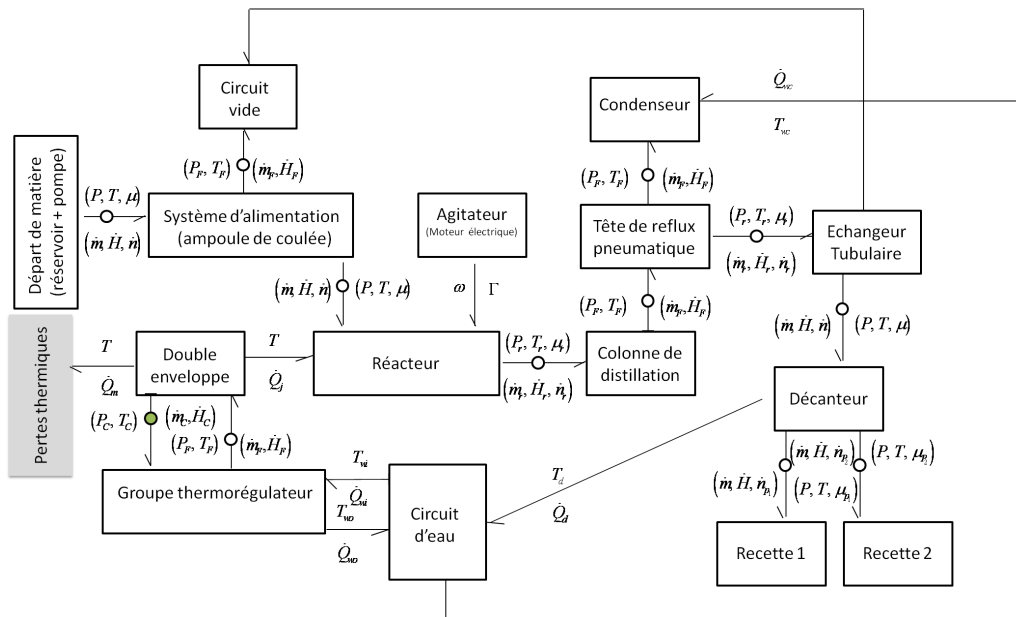


FIG. 5.5 – Bond graph à mots de l'installation chimique

Le système étudié est décomposé en sous systèmes comme le montre le bond graph à mots de la figure 5.5. Le Bond Graph à mots est l'étape technologique de la modélisation, qui consiste à décomposer le processus en un ensemble de sous-systèmes, liés par des variables de puissance (en non des signaux comme dans un bloc diagramme). Les différents sous-systèmes

(le réacteur, la double enveloppe, le système de refroidissement,...) et leurs interconnexions (vannes, pompes et les différents phénomènes) sont facilement identifiés.

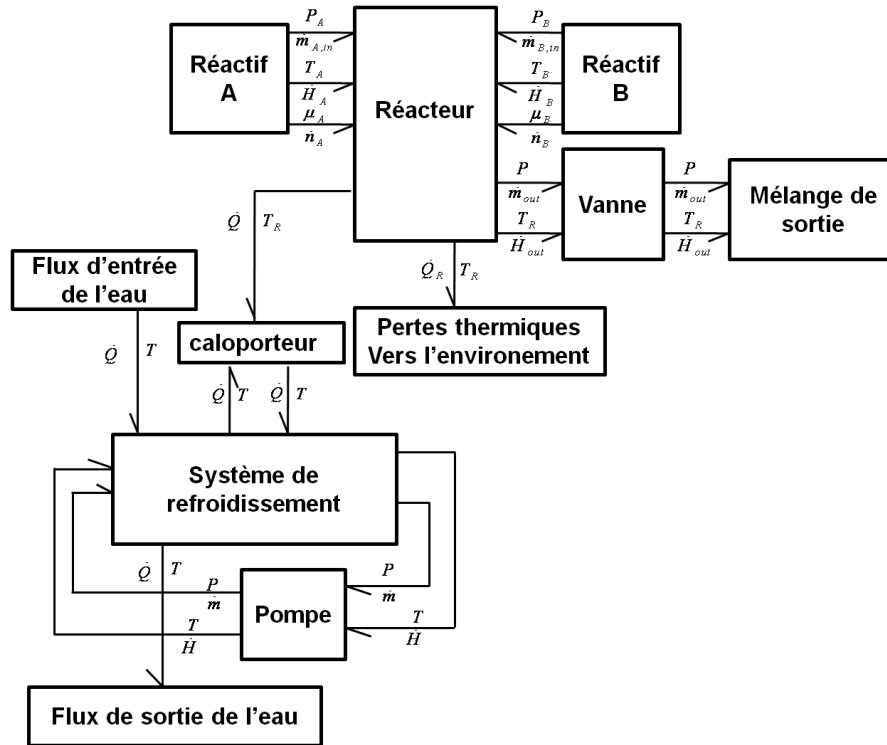


FIG. 5.6 – Bond graph à mots détaillé de la partie étudiée

5.3.2 Modèle Pseudo Bond Graph global

Dans cette partie est présenté un modèle pseudo bond graph du système développé à partir des bilans massiques et énergétiques. En raison de l'aspect fonctionnel et modulaire du bond graph, chaque sous système peut être modélisée séparément. Pour simplifier cette tâche, tous les liens sont numérotés.

5.3.2.1 Système d'alimentation (Ampoule de coulée)

L'ampoule de coulée permet de stocker les réactifs avant d'être introduire dans le réacteur. Le système d'écoulement des réactifs dans l'ampoule de coulée est basé sur la différence de pression. On fait crée un vide dans l'ampoule de coulée par l'ouverture de la vanne V_2 , puis on ouvre la vanne V_1 pour avoir l'écoulement des réactifs dans l'ampoule. Avant de laisser ces réactifs descendre vers le réacteur, il faut mettre ce mélange sous la pression atmosphérique, ce pour cela, on ouvre la vanne V_3 pour casser le vide et enfin on ouvre la vanne V_5 pour diriger le mélange vers le réacteur. Le réglage de débit d'écoulement est réglé manuellement

par la vanne V_4 , Fig. 5.3.

P_{atm} et P_{vac} représentent respectivement les sources de création de vide dans le bulbe et la pression atmosphérique.

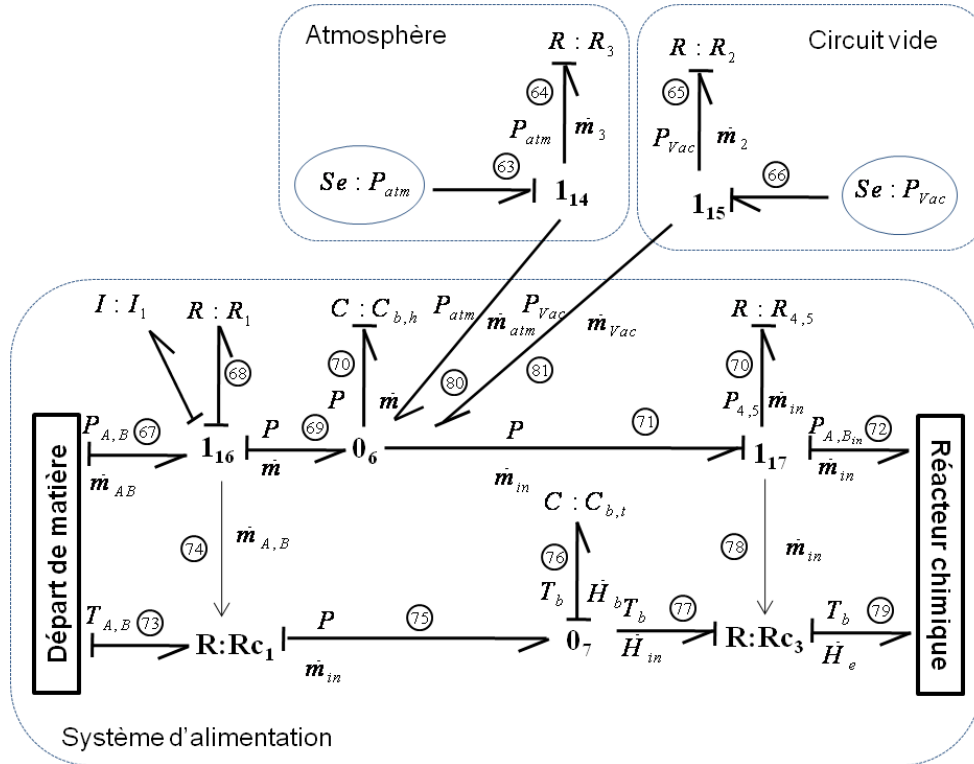


FIG. 5.7 – Modèle Pseudo bond graph de l'ampoule de coulée

Les caractéristiques des vannes sont modulées par l'élément dissipatif $R : R_i$ (for $i = 1,2,3,4,5$). Le couplage hydrothermique d'énergie est représenté par des résistances fictives à l'entrée et la sortie du système d'alimentation, désignées respectivement par R_{C1} et R_{C3} . Les éléments dynamiques $C_{b,h}$ et $C_{b,t}$ représentent respectivement l'énergie hydraulique et thermique accumulée dans l'ampoule de coulée, comme la montre la figure 5.7.

5.3.2.2 Cuve de réacteur

Le modèle pseudo-bond graph du cuve de réacteur relié avec son environnement dans une décomposition modulaire est donnée par la figure 5.8.

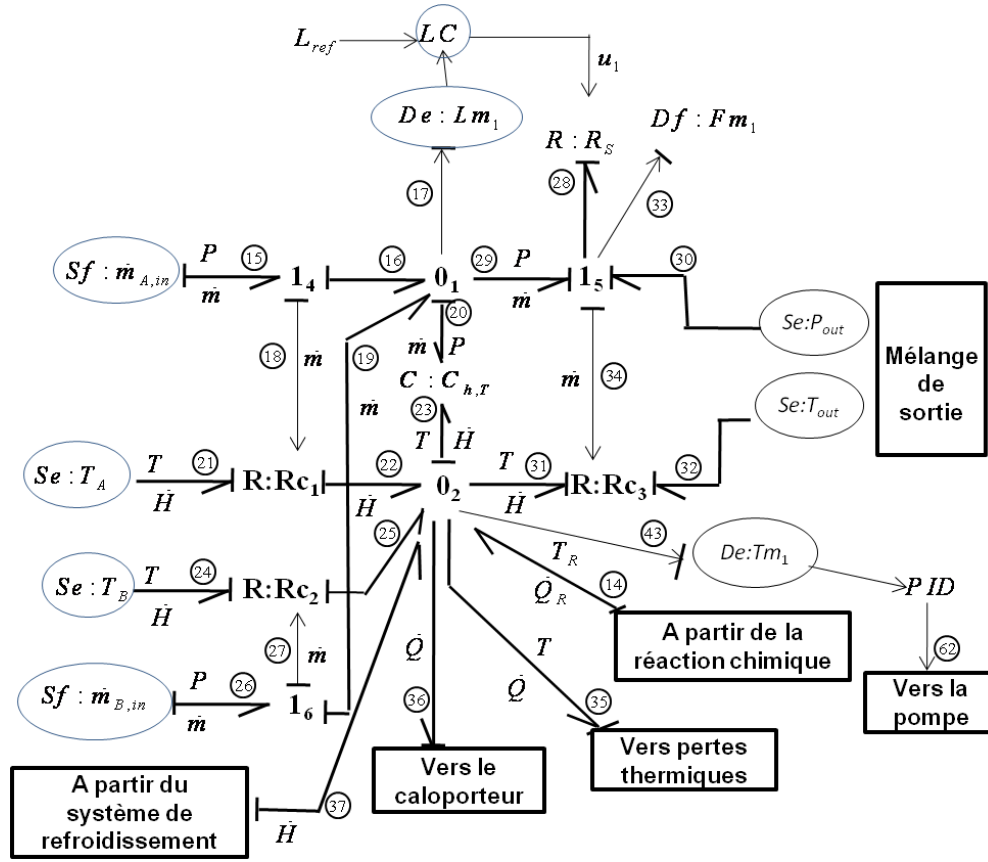


FIG. 5.8 – Modèle Bond Graph du réacteur avec son environnement

Considérons le domaine fluide et thermique dans le réacteur, les bilans de la masse et de l'énergie sont représentés respectivement par les jonctions 0_1 et 0_2 .

$$0_1 : \dot{m}_{20} = \dot{m}_{A,in} + \dot{m}_{19} - \dot{m}_{29} \quad (5.5)$$

$$0_2 : \dot{H}_{23} = \dot{H}_{22} - \dot{H}_{31} + \dot{H}_{25} + \dot{H}_{37} + \dot{Q}_{14} - \dot{Q}_{35} - \dot{Q}_{36}$$

L'énergie couplée, emmagasinée par le fluide dans le réservoir est modélisée par le multiport C pour l'énergie hydraulique et thermique (C_h : hydraulique, C_t : thermique). Les deux dérivées de variables d'état correspondent à la masse m_{20} et l'énergie interne H_{23} . Les équations constitutives $\Phi(e,q)$ du multiport C , reliant l'effort et l'intégral du flux (déplacement général q), sont pour la partie hydraulique

$$P_{17} = \frac{1}{C_h} \int \dot{m}_{20} dt = \frac{m_{20}}{C_h} \quad (5.6)$$

Pendant que $P = \rho g \frac{V}{A} = \frac{\rho g m_{20}}{A}$, donc $C_h = A/g$. A est la section du réservoir et g est la constante de gravité.

Pour le phénomène thermique, l'effort thermique est

$$T_{23} = \frac{1}{C_t} \int \dot{H}_{23} dt = \frac{H_{23}}{C_t} = \frac{H_{23}}{m_{20} C_V} \quad (5.7)$$

La non linéarité est dû aux couplages de deux variables d'état m_{20} et H_{23} . Donc, la capacité thermique n'est pas constante: $C_t = m_{20} C_V$. C_V est la capacité thermique spécifique du liquide à volume constant. Les sources de flux molaire thermique d'entrée \dot{H}_i ($i = 22, 25$) dependent des sources hydrauliques $\dot{m}_{j,in}$ ($j = A, B$) et les températures d'entrée sont considérés connues T_k ($k = 21, 24$).

$$\dot{H}_i = \dot{m}_{j,in} C_{pi} T_k \quad (5.8)$$

Ce couplage hydrau-thermique d'énergie est modélisé par des résistances fictives à l'entrée et à la sortie du réservoir, notées respectivement par R_{C1} , R_{C2} et R_{C3} .

Le flux thermique de sortie \dot{H}_{31} s'écoule du réacteur à une température T_{23} du mélange écrites selon cette expression

$$\dot{H}_{31} = \dot{m}_{29} C_p T_{23} \quad (5.9)$$

\dot{Q}_i ($i = 14, 35, 36$) et \dot{H}_{37} sont fournis par d'autre sous-systèmes (voir ci-dessous).

5.3.2.3 Modèle des vannes

La caractéristique de la vanne de sortie est modélisée par l'élément résistif R : R_s (représentant une perte de charge hydraulique) modulé par le signal de commande u_1 délivré par le régulateur LC . Le flux molaire donné par ce dernier est comme suit :

$$\dot{m}_{29} = F(u_1, R_s, P_{20}, P_{out}) = R_s(u_1) \sqrt{(P_{20} - P_{out})} u_1 \quad (5.10)$$

$R_s(u_1)$ est la fonction représentant le coefficient de décharge de la vanne (qui dépend de son type: linéaire, quadratique, pourcentage égal...ect) et P_{out} est la pression de sortie qui est égale à la pression de l'environnement.

5.3.2.4 Modèle de la réaction chimique

Les réservoirs de stockage des produits A et B sont considérés dans le présent travail comme une source d'effort chimique ($Se : \mu$) fournissant un potentiel chimique du produit. Le flux molaire \dot{n}_i est calculé à partir du flux massique du mélange M_i . Les éléments de transformation pour cette opération (n'est pas représentés ici) peuvent être rajoutés dans le bond graph.

Dans le domaine chimique, les jonctions 1_i (avec $i = 1, 2, 3$) sont utilisées pour indiquer l'égalité des flux molaires des différents constituants (A, B, C, D) de la réaction. Dans un pseudo bond graph (utilisant l'affinité chimique A et la vitesse de la réaction J en tant que variables de puissance), cette jonction 1 représente l'équilibre entre les espèces chimiques dans

la réaction elle-même. Les transformateurs (TF) modélisent les transformations chimiques des réactifs de la réaction en produits. Les modules de ces transformateurs désignent les coefficients stœchiométriques de la réaction (selon l'équation 5.2) *Couenne & al. (2006) [1]* *A.R. Khaled & al. (2006) [128]*. Dans notre cas, ces coefficients sont égaux à un.

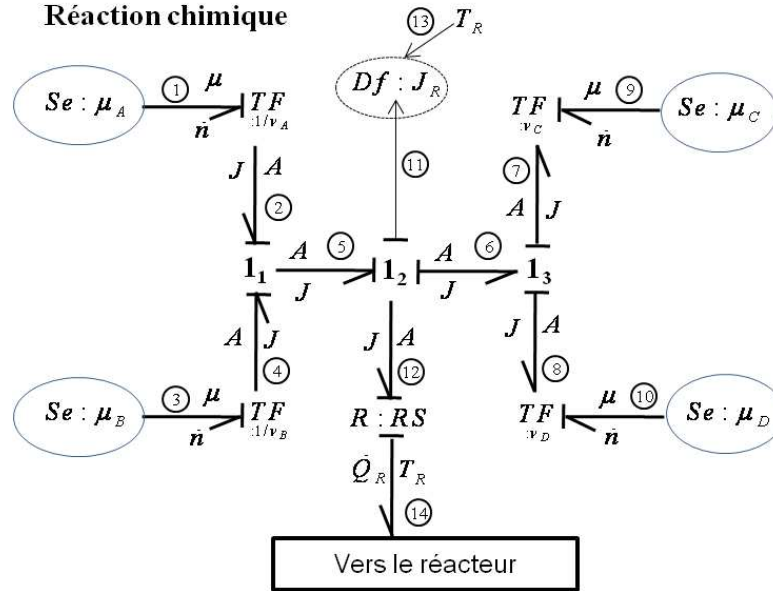


FIG. 5.9 – Modèle Bond Graph de la réaction chimique

Du point de vue phénoménologique, la cinétique de la réaction peut être modélisée par un élément résistif, dont la loi constitutive est algébrique et relie le flux J et l'effort A . Il est bien connu que, bien qu'une transformation chimique obéisse à la loi de conservation de toute la masse, les réactifs chimiques ne sont pas conservés mais subissent une transformation dissipative lors de l'obtention d'un nouveau produit.

Dans le champ $R : RS$, la chaleur produite par la réaction est calculée. La cinétique de la réaction peut être modélisée en termes d'affinité directe A_f (correspondant à la réaction directe représentée par e_5 dans le modèle Bond Graph) et une affinité inverse A_r (correspondant à la réaction inverse représentée par e_6). En effet, lorsque $A_f = A_r$, la réaction s'arrête (le courant s'arrête lorsque la différence de tension (potentiel) est nulle). La différence d'affinité est une force chimique analogue à la différence de pression ou à la différence de tension électrique.

Si nous sommes relativement proches de l'équilibre chimique, la vitesse de réaction est une fonction de la température et uniquement de la différence des affinités:

$$J = \Phi((A_f - A_r), T) \quad (5.11)$$

avec $(A_f - A_r)$ est la force conduite représentés dans le modèle BG par l'effort e_{12} :

$$e_{12} = A_f - A_r = (v_A \mu_A + v_B \mu_B) - (v_C \mu_C + v_D \mu_D) \quad (5.12)$$

La vitesse de la réaction est donnée par la relation empirique (modélisées par l'élément RS) est la suivante :

$$J = K_f(T) \left[\left(\frac{n_A}{V} \right)^{\nu_A} \left(\frac{n_B}{V} \right)^{\nu_B} \right] - K_r(T) \left[\left(\frac{n_C}{V} \right)^{\nu_C} \left(\frac{n_D}{V} \right)^{\nu_D} \right] \quad (5.13)$$

A l'équilibre, la constante de vitesse $K(T)$ est

$$K_f(T) e^{-\frac{A_{f0}}{RT}} = K_r(T) e^{-\frac{A_{r0}}{RT}} = K(T) \quad (5.14)$$

où A_{f0} et A_{r0} sont les affinités directe et inverse calculés à une température constante. La vitesse de la réaction est donnée par :

$$J = K(T) e^{\frac{A_f - A_r}{RT}} = \Phi(A_f, A_r, T) \quad (5.15)$$

$K(T)$ est la constante qui varie avec la température thermodynamique selon la relation d'Arrhénius.

En outre, le produit de l'affinité chimique totale A par la vitesse d'avancement constitue une puissance qui se dissipe dans le champ RS et génère ainsi de l'entropie (puissance chimique = puissance thermique). Le multiport RS absorbe alors de la puissance chimique et produit une quantité équivalente de puissance égale au produit de flux de chaleur (\dot{Q}_R : Chaleur de la réaction chimique) par la température absolue (T_R : la température du milieu) *Perelson & al. (1975) [144]*.

Ainsi, RS est utilisé comme un lien entre l'énergie massique et molaire du sous système du réacteur. Il s'agit d'un élément à deux ports reliant les bilans énergétiques et molaires.

5.3.2.5 Pertes thermiques

Les éléments R_m et R_0 décrivent les pertes thermiques du réservoir vers le métal et du métal vers l'environnement, figure 5.10. La dissipation de flux de chaleur à travers le mur du réacteur peut être déterminée en utilisant la conductivité thermique, l'épaisseur et la différence de température $T_{35} - T_{38}$ entre les côtés et la surface de mur. L'élément C : C_L modélise le stockage de l'énergie dans le mur. Une source d'effort est également présent, Se_{40} , représentant la température de l'environnement, et la chaleur dissipée vers l'environnement est calculé à partir de 18. Les flux thermiques peuvent être calculés en utilisant la loi de Kirchhoff:

$$\begin{aligned} \dot{Q}_{37} &= (T_{38} - T_{35})/R_m \\ \dot{Q}_{42} &= (T_{39} - T_{40})/R_0 \end{aligned} \quad (5.16)$$

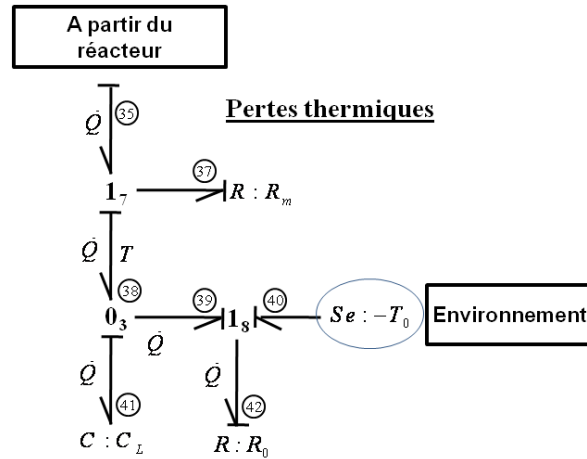


FIG. 5.10 – Modèle Bond Graph des pertes thermiques

La température associée à l'énergie thermique (comme une variable d'état représenté par l'élément C_L) stockés par le mur de la capacité thermique C_L est la suivante :

$$T_{41} = \frac{1}{C_L} \int \dot{Q}_{42} dt \quad (5.17)$$

5.3.2.6 Caloporteur et système de refroidissement

La température est supposée constante et homogène. Le flux de chaleur \dot{Q}_{44} est supposée être proportionnelle à la différence de température entre la double enveloppe et le mélange à l'intérieur du réacteur : $\dot{Q}_{44} = (T_{36} - T_{46}) / R_j$. La conductance de transfert de chaleur, notée $UA = 1/R_j$, représente les phénomènes conjugués, combinés de la conduction de chaleur dans la paroi du réacteur et le transfert de chaleur par convection entre le mélange de réaction, le fluide qui coule grâce à la cuve et la paroi du réacteur.

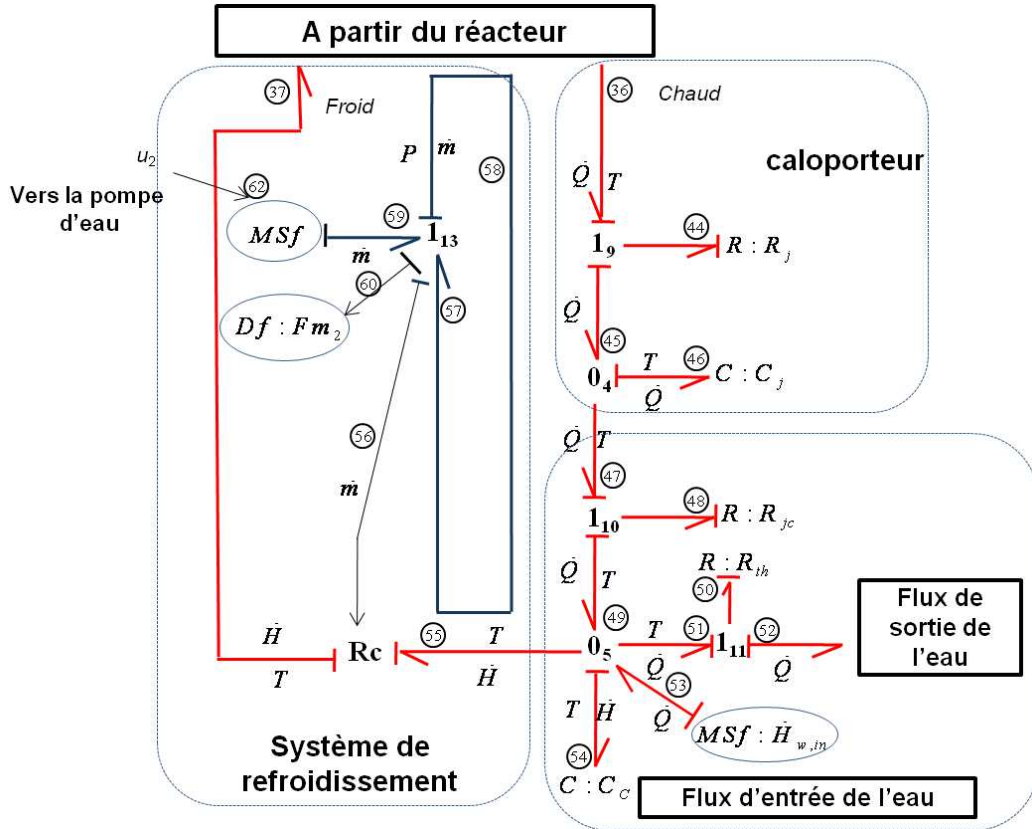


FIG. 5.11 – Modèle bond graph du caloporteur et système de refroidissement

Le bilan d'énergie dans le caloporteur est représenté par une jonction 0_4 . L'élément dynamique C_j représente l'accumulation d'énergie dans la double enveloppe (caloporteur), et son équation est la suivante

$$T_{46} = \frac{1}{C_j} \int \dot{Q}_{46} dt \quad (5.18)$$

La variable C_j est le produit $m_j \times C_{Pj}$, avec m_j est la masse totale du liquide et C_{Pj} est la capacité thermique spécifique du liquide à pression constant.

La loi constitutive de l'énergie thermique dans le serpentin de refroidissement est représentée par la jonction 0_5 . Le débit enthalpique de l'eau froide est $\dot{H}_{55} = \dot{Q}_{49} - \dot{Q}_{51}$. L'échange thermique par conduction avec la source d'eau froide est déterminée par le flux de chaleur de l'eau en entrée Q_{52} et en sortie Q_{53} .

L'élément dynamique C_c représente l'accumulation d'énergie dans le serpentin de refroidissement et il est donné par la relation suivante:

$$e_{54} = T_{54} = \frac{1}{C_c} \int \dot{H}_{54} dt \quad (5.19)$$

La variable C_c est le produit $m_c \times C_{pc}$, avec m_c est la masse totale du liquide froid et C_{pc} est la capacité thermique spécifique du liquide à pression constante dans le système de

refroidissement. Le flux d'enthalpie d'écoulement de l'eau froide entrante dans le réacteur est : $\dot{H}_{55} = \dot{Q}_{49} - \dot{Q}_{54} - \dot{Q}_{51}$.

La circulation du fluide du/vers le caloporteur à travers le circuit de refroidissement peut générer un transfert de chaleur (des phénomènes de conduction et de convection). L'élément résistif R_{jc} est utilisé pour représenter la dissipation d'énergie lors de ce transfert. R_{th} modélise la dissipation de l'énergie lors du transfert thermique à la sortie de l'eau.

Le couplage d'énergies thermo-fluidiques est représenté par la résistance de couplage fictive R_C et l'échange thermique avec la source de l'eau froide est déterminé par le flux de chaleur de l'eau en entrée et en sortie .

5.3.3 Simulation et validation du modèle

Avant d'être utilisé dans la génération des RRAs, le modèle bond graph du réacteur chimique a été validé à travers des comparaisons entre sa sortie (résultats de simulation) et les observations expérimentales fournies par les différents capteurs.

Les conditions initiales utilisées dans les simulations sont des approximations des valeurs expérimentales correspondant à des valeurs de consignes données.

5.3.3.1 Modèle dynamique et sa validation

Le modèle dynamique de l'installation est généré de façon automatique par Symbols. Il est donné sous la forme analytique suivante

$$\begin{cases} \dot{x} = f(x,u) \\ y = g(x,u) \end{cases} \quad (5.20)$$

où f et g sont des fonctions non linéaires, x est l'état du système, y le vecteur des mesures et u le vecteur d'entrées.

Les paramètres sont exprimés dans les modèles bond graphs des composants et sont liés en fonction de la structure du modèle architectural.

On introduire dans cette partie l'évolution de concentration de chaque constituant de la réaction au cours de temps.

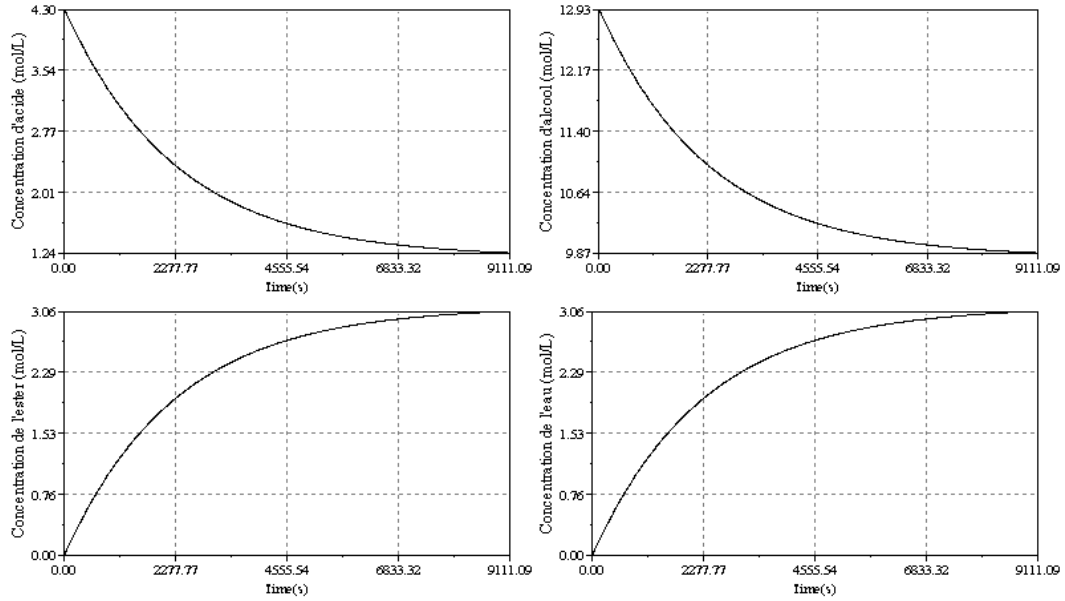
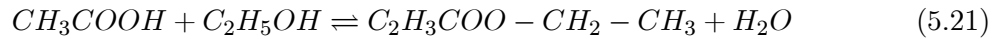


FIG. 5.12 – Variation des concentrations de différents composants de la réaction

L'équation de la réaction d'estérification est :



à $t = 0$, $C_{a0} = 4.313 \text{ molL}^{-1}$ et $C_{al0} = 12.93 \text{ molL}^{-1}$

à $t = t_{\text{éq}}$,

$$C_a = C_{a0} * (1 - X_{ae}) \quad (5.22)$$

$$C_{al} = C_{al0} - C_a * X_{ae} \quad (5.23)$$

$$C_{es} = C_e = C_{a0} * X_{ae} \quad (5.24)$$

Les indices (a , al , e et es) désignent respectivement l'acide, l'alcool, l'eau et l'ester tandis que l'indice ae représente la fraction molaire entre l'acide et l'ester.

L'évolution de la concentration d'acide et d'alcool selon l'équation (5.22) et (5.23), permet de nous donner une évolution de l'ester et de l'eau selon l'équation (5.24).

La validation du modèle consiste à utiliser le même couple d'entrée U pour le système réel et le modèle, puis de comparer les sorties issues du système réel, avec celles du modèle bond graph comme le montre le schéma de la figure 5.13. Les résultats sont donnés par les figures 5.15, 5.16 et 5.23.

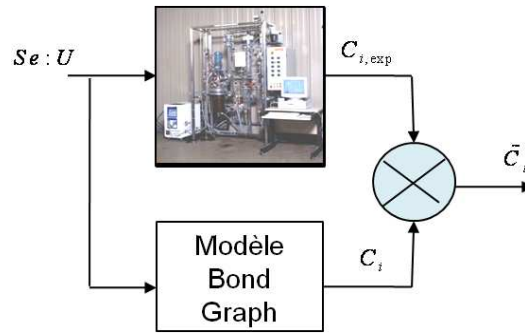


FIG. 5.13 – Schéma de validation du modèle

On note que le prélèvement des valeurs pratiques commence 6 minutes après le déroulement de l'installation et le départ de l'agitation. A l'aide de MATLAB on a essayé de comparer les résultats de simulation fournis par SYMBOLS (Figure 5.14 et 5.17) et celle obtenus en travaux pratiques. Cette analyse est réalisée sur la base des résultats de simulation et des données en hors ligne acquises lors des différents modes de fonctionnement de l'installation du réacteur chimique.

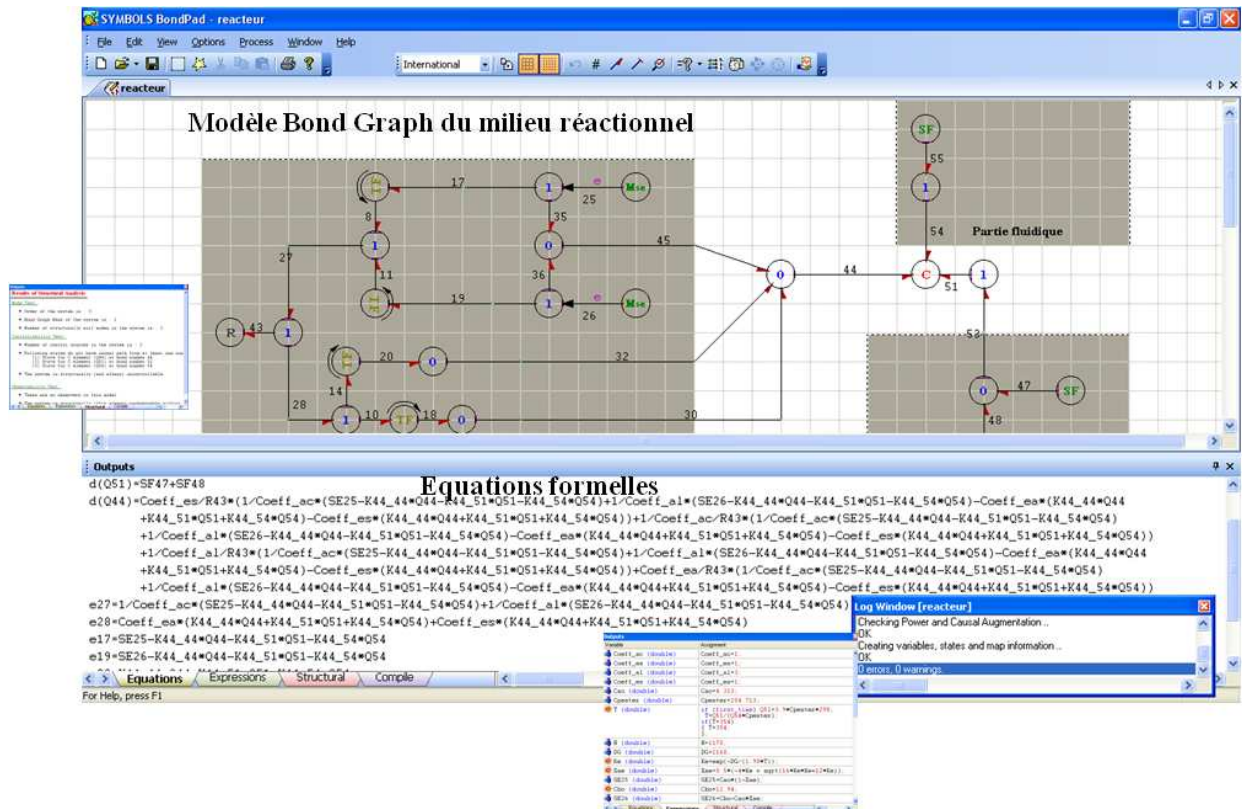


FIG. 5.14 – Validation du modèle de la réaction chimique en utilisant Symbols

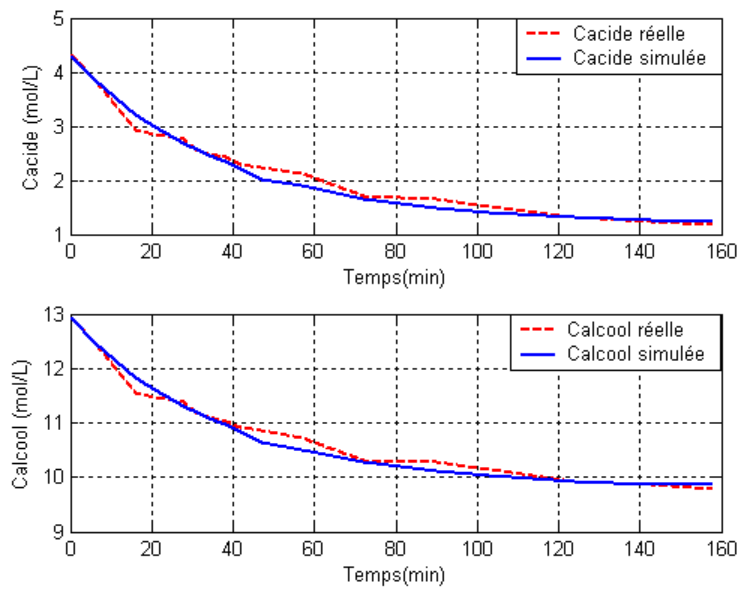


FIG. 5.15 – Evolution des concentrations d'acide et d'alcool

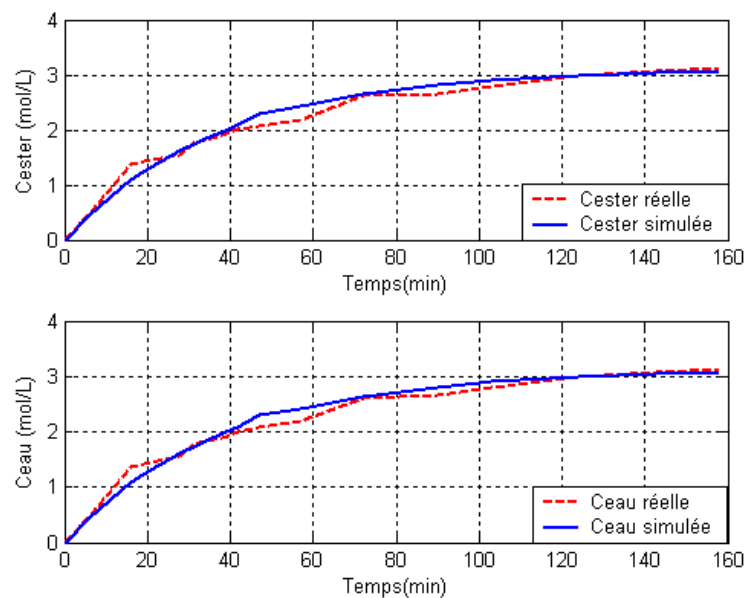


FIG. 5.16 – Evolution des concentrations d'ester et d'eau

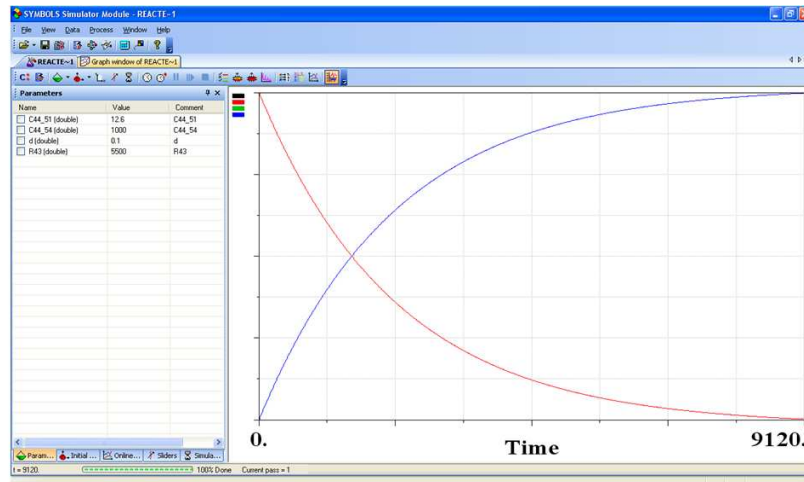


FIG. 5.17 – Interface de simulation montrant les courbes d'évolution des concentrations des réactifs et des produits

Ces figures 5.15 et 5.16 montrent l'évolution de concentration d'acide acétique et celle de l'ester formé. On remarque la présence d'une faible erreur entre les courbes en traits interrompus (valeurs réelles) et celles en traits continus (valeurs simulées) dû aux erreurs de mesure et aux variations paramétriques. En effet, les mesures de différentes concentrations sont faites par un dosage acido-basique d'une quantité prélevée à chaque instant de mesure, cette méthode de mesure engendre des erreurs dues principalement à la qualité de la base utilisée dans le dosage et à l'imprécision de lecture.

Les concentrations d'eau et d'ester sont égaux puisqu'ils ont les mêmes coefficients stoechiométriques. Alors, ces produits se forment avec la même vitesse de disparition des réactifs.

Cette comparaison montre une bonne coïncidence en amplitude mais une faible erreur en phase. Cette erreur est attribuée aux bruits des mesures et aux retards dans les réactions des actionneurs (ouverture et fermeture des vannes). Dans ces figures, l'erreur entre les résultats de simulation et expérimentaux correspondant aux concentrations pour chaque composant i $\{i = a, al, e \text{ et } es\}$ est représenté par $\Delta C_i = C_i(\text{exp}) - C_i(\text{sim})$. On a constaté que les concentrations des produits et des réactifs dans le réacteur, données par les expériences, sont approximativement de 0.22 à 0.27 mol/L (de 6% à 7%) inférieures aux concentrations obtenues par les simulations. Cette différence est due aux hypothèses de modélisation formulées précédemment et dans lesquelles l'eau et la vapeur ont été considérées comme un mélange homogène.

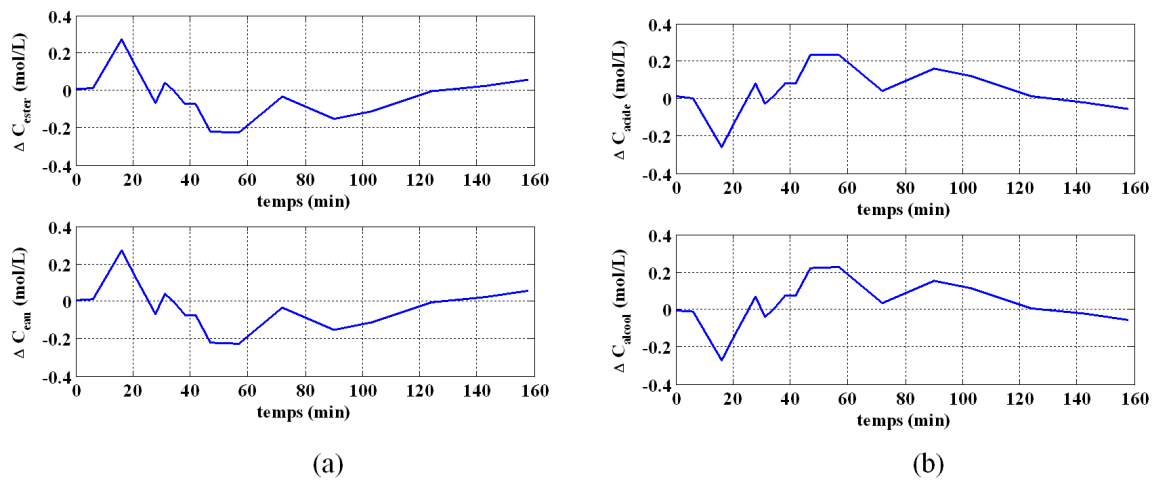


FIG. 5.18 – Comparaison entre les résultats de simulation et expérimentaux pour (a) les concentrations des réactifs et (b) les concentrations des produits

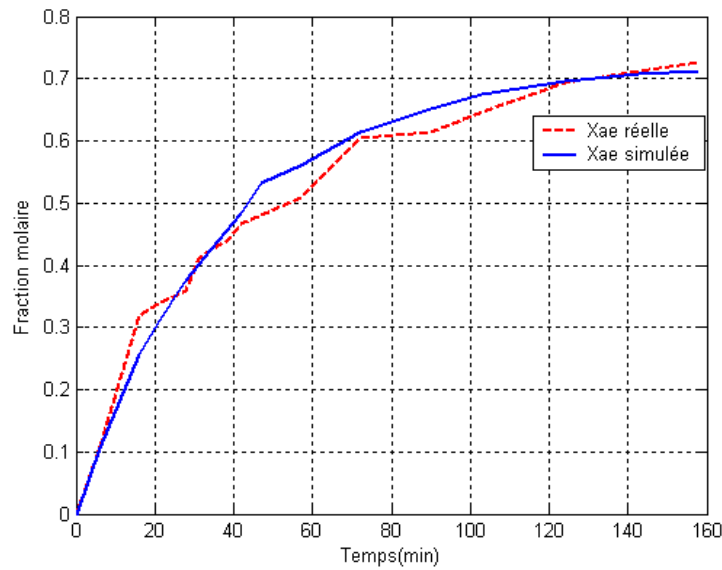


FIG. 5.19 – Evolution de la fraction molaire pratique et simulée

La constante d'équilibre trouvée K_{eq} lors de la manipulation égale à 0.14 ce qui est très loin de celle donnée en littérature $K_{\text{eq}} = 2.314$. Cela est expliqué par le fait qu'on a considéré que la solution est idéale mais en réalité les coefficients d'activité des espèces chimiques sont différents de 1 car on opère avec des concentrations très importantes.

Pendant environ 3 heures de début de déroulement de la réaction, la fraction molaire X_{ae} évolue en fonction de temps et tend vers la valeur 0.71, figure 5.19. On note que, selon la littérature et pour une constante d'équilibre $K_{\text{eq}} = 2.314$, la valeur finale de la fraction molaire obtenue après (68 heures) est égale à 0.8. Alors, les différentes valeurs obtenues pendant cette manipulation (durée 3 heures) sont acceptables.

La figure 5.19 montre l'évolution de la fraction molaire X_{ae} pendant la manipulation (en traits interrompus) et celle estimée en utilisant la simulation sur Symbols (en traits continus). La fraction molaire X_{ae} est calculée en fonction de la concentration d'acide cela explique l'écart entre les deux allures. Cette fraction peut atteindre en régime permanent une valeur de 0.71 qui est égale à la valeur expérimentale. X_{ae} représente le taux de formation de l'ester et donne une idée sur le déplacement de l'équilibre chimique de la réaction.

Cette différence entre la simulation et la pratique est due aux hypothèses de modélisation formulées précédemment et dans lesquelles l'eau et la vapeur ont été considérées comme un mélange homogène.

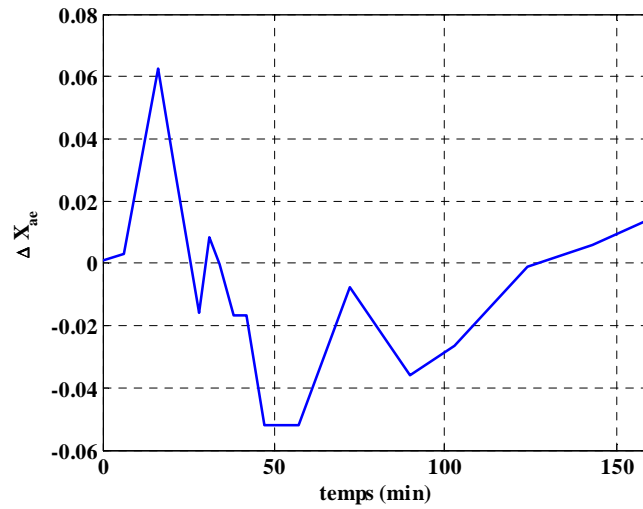


FIG. 5.20 – Comparaison entre les résultats de simulation et expérimentaux pour la fraction molaire

Le logiciel Symbols donne immédiatement une représentation d'état à partir du modèle Bond Graph généré. En parallèle à la génération du modèle dynamique par FDIPad, on peut modifier aussi les paramètres ou les expressions du modèle (Figure 5.22) où des valeurs numériques peuvent leur être attribuées. Cette fonctionnalité est importante car elle permet d'introduire n'importe quel non linéarité.

FIG. 5.21 – Représentation d'état générée automatiquement par le logiciel Symbols

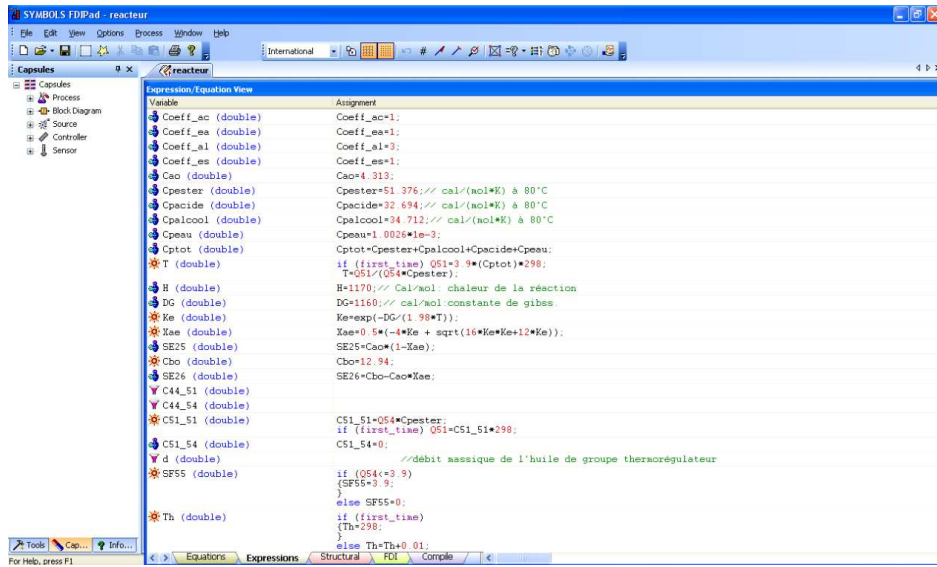


FIG. 5.22 – Liste des paramètres utilisés dans le modèle Bond Graph

5.4 Conception du système de surveillance

Le système de surveillance doit fournir, à partir des valeurs des variables connues et d'un ensemble de relations de redondance, une information sur la présence ou l'absence de défaillance et la cause de cette défaillance éventuelle. On définit tout d'abord le cahier des charges.

5.4.1 Cahier des charges

Le cahier des charges doit, dans un premier temps, préciser quelles sont les causes de défaillance qui devront être prises en compte. A chacune de ces causes, il devra être possible d'associer, dans le modèle du système, une relation de connaissance et donc une variable connue ou un paramètre du modèle. La probabilité de fausse alarme (détection d'une anomalie en fonctionnement normal), la probabilité de non-détection (défaillance non détectée) et le délai de détection précisent les performances attendues en termes de détection. La capacité de localisation indique quant à elle la possibilité de retrouver l'origine de la défaillance, c'est à dire d'identifier la cause de la panne parmi les causes prises en compte par le système de surveillance. L'idéal serait que toutes les causes de défaillance retenues soient parfaitement détectables et localisables.

Les caractéristiques techniques du FDI sont prévues pour énumérer ces défauts qui doivent être considérés. Dans l'industrie, ces composants critiques considérés peuvent être étudiés par

l'analyse des modes de défaillances et de leurs effets de Criticité (AMDEC) (FMEA en anglais : *Failure Mode and Effect Analysis*). AMDEC est une procédure basée sur la gestion afin d'analyser des modes de défaillance potentiels dans un système pour la classification par sévérité ou la détermination de l'effet des échecs sur le système.

Les défaillances dans un système peuvent provenir d'un capteur ou d'une modification des paramètres d'un élément (actionneur ou processus). Les défauts auxquels nous nous intéressons, dans cette partie, sont de type physique, capteur et actionneur. Les défauts physiques à surveiller concernent : les fuites de produit au sein du réacteur, l'isolation thermique (calorifugeage) et l'apparition des réactions secondaires. Les défauts actionneurs étudiés peuvent affecter le mauvais fonctionnement de la pompe et de la servo-vanne. Enfin les défauts matériels liés au mauvais fonctionnement des capteurs (de température et de niveau) et des contrôleurs sont, aussi, à surveiller.

5.4.2 Générations des Relations de Redondance Analytique (RRAs)

Il est préférable (pour éviter les problèmes numériques d'évaluation des résidus) de générer des RRAs sur un modèle Bond graph en causalité intégrale lorsque les conditions initiales sont connues, mais dans la majorité des procédés, ces conditions sont inconnues. Nous allons donc dans ce qui suit développer une procédure de surveillance à base de modèles Bond Graph en causalité dérivée.

Le défaut dans le domaine chimique (apparition d'événement secondaire, dégagement d'odeur toxique ou explosif, etc.) lié au phénomène de transformation de matière peut être détecté en l'associant à l'indicateur de fautes (RRA) issue de l'équation de balance des affinités chimiques déduite de la jonction J_{12} :

$$J_{12} : e_5 - e_6 - e_{12} = 0 \quad (5.25)$$

Pour transformer cette contrainte à une RRA, les variables doivent être connues. On les éliminera en utilisant l'algorithme développé déjà dans le troisième chapitre.

L'indicateur de faute déduit sera sensible également au défaut chimique tel que l'apparition des événements secondaires, dégagement du gaz toxique ou explosif, etc... En effet, si cette équation structurale (loi de conservation) n'est pas satisfaisante, cela signifie qu'une certaine force de conduite additionnelle (affinité chimique) est ajoutée.

La vitesse J (*mole/s*) de la réaction, donnée par le $Df : J_R$, est calculé à partir des mesures du capteur de température T_{m1} . Cette relation est une fonction non linéaire qui dépend de la température du milieu réactionnel T_R et de la concentration C_i de chaque constituant i , selon l'équation d'Arrhénius suivante

$$J_R = k_f (T_{m1}) \prod C_i^{\theta_i} \quad (5.26)$$

avec $C_i = n_i/V$, n_i est le nombre de mole de chaque constituant i et V est le volume du mélange dans le réacteur.

Les variables inconnues de la contrainte (5.25) peuvent être éliminées (calculées) en parcourant les chemins causaux sur le modèle bond graph de la figure 5.9.

$$e_5 \longrightarrow \Phi_{J_{11}} \longrightarrow e_2 \longrightarrow \Phi_{(TF:1/\nu_A)} \longrightarrow e_1 \longrightarrow Se : \mu_A \implies e_2 = \nu_A \mu_A$$

$$e_5 \longrightarrow \Phi_{J_{13}} \longrightarrow e_4 \longrightarrow \Phi_{(TF:1/\nu_B)} \longrightarrow e_3 \longrightarrow Se : \mu_B \implies e_4 = \nu_B \mu_B$$

Cependant $e_5 = e_2 + e_4$ (à partir J_{11}), on obtient $e_5 = \nu_A \mu_{A,m} + \nu_B \mu_{B,m}$.

e_6 est calculée (éliminée) à partir des chemins causaux suivants:

$$e_6 \longrightarrow \Phi_{J_{13}} \longrightarrow e_7 \longrightarrow \Phi_{(TF:\nu_C)} \longrightarrow e_9 \longrightarrow Se : \mu_C \implies e_7 = \nu_C \mu_C$$

$$e_6 \longrightarrow \Phi_{J_{13}} \longrightarrow e_8 \longrightarrow \Phi_{(TF:\nu_D)} \longrightarrow e_{10} \longrightarrow Se : \mu_D \implies e_8 = \nu_D \mu_D$$

Cependant $e_6 = e_7 + e_8$ (à partir J_{13}), $e_6 = \nu_C \mu_C + \nu_D \mu_D$

e_{12} est éliminé du parcours du chemin causal (utilisant le modèle chimique le sous-système de réacteur) :

$$e_{12} \longrightarrow \Phi_{(RS)} \longrightarrow e_{14} \longrightarrow De : Tm_1$$

$$\text{Ainsi } e_{12} = \Phi_R^{-1}(Tm_1, J_R) = RTm_1 \text{Log} \left(1 - \frac{\dot{n}_1}{\vartheta_A V J_R} \right) = RTm_1 \text{Log} \left(1 - \frac{\dot{n}_{A,in}}{J_R \vartheta_A V M_A} \right)$$

La première RRA, r_1 , déduite de l'équation 5.25, est donnée par

$$r_1 = (\vartheta_A \mu_{A,m} + \vartheta_B \mu_{B,m}) - (\vartheta_C \mu_{C,m} + \vartheta_D \mu_{D,m}) - RTm_1 \text{Log} \left(1 - \frac{\dot{n}_{A,in}}{\vartheta_A V J_R} \right) \quad (5.27)$$

A partir de 0_1 et 0_2 jonctions (Fig. 5.8), deux RRAs peuvent être obtenues. Ces RRAs, déduites de la loi de conservation des jonctions liées aux énergies thermique et hydraulique, seront sensibles aux fuites (pour la conservation de masse) et à l'isolation thermique (pour la conservation d'énergie).

L'indicateur de faute produit de la jonction 0_1 est :

$$f_{16} - f_{20} - f_{29} + f_{19} = 0 \quad (5.28)$$

On élimine la variable inconnue de la RRA candidate comme suit :

$$f_{16} = f_{15} = Sf : \dot{m}_{A,in} \quad (5.29)$$

• f_{20} est calculée à partir du parcours du chemin causal :

$$f_{20} \longrightarrow \Phi_C^{-1} \left(\frac{df_{20}}{dt}, C_h \right) \longrightarrow e_{20} \longrightarrow De : Lm_1 \longrightarrow \rho g Lm_1$$

avec Lm_1 , ρ et g sont respectivement le niveau mesuré, la densité du mélange et la gravité.

e_{20} est la pression (effort) dans le fond du réacteur $e_{20} = Lm_1 \rho g$. \dot{f}_{20} est la dérivé de f_{20} .

Ainsi $C_h = \frac{A}{g}$, en causalité dérivée, on obtient

$$f_{20} = C_h \frac{de_{20}}{dt} = A \rho \frac{dLm_1}{dt} \quad (5.30)$$

• D'autres variables inconnues sont $f_{19} = Sf : \dot{m}_{B,in}$ et $f_{29} = Df : Fm_1$

Finalement, à partir de la jonction 0_1 , la RRA (r_2) est comme suit :

$$r_2 = \dot{m}_{A,in} - A\rho \frac{dLm_1}{dt} - Fm_1 + \dot{m}_{B,in} \quad (5.31)$$

En procédant de la même façon, une troisième RRA peut être générée à partir de l'équation de la jonction 0_2 de la figure 5.8 et donnée par la relation suivante

$$f_{22} + f_{25} + f_{14} + f_{37} - f_{23} - f_{31} - f_{35} - f_{36} = 0 \quad (5.32)$$

Cette RRA ne peut pas être générée, quelques variables inconnues ne sont pas éliminées (calculées) : pas des chemins causaux vers les variables connues.

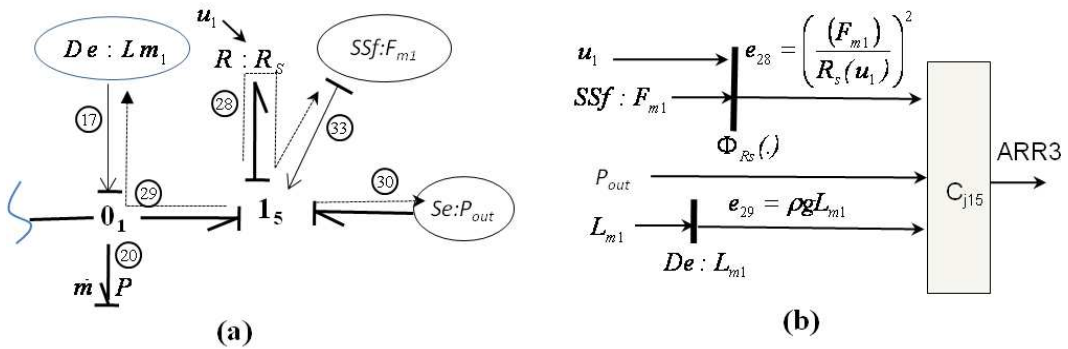


FIG. 5.23 – Bond graph (a) et graphe orienté de servo-vanne.

La surveillabilité d'un défaut φ exigent que : (i) le sous-système est observable (ii) que le défaut φ appartient à la partie structurellement observable de la partie sur-déterminée du système à surveiller.

À partir d'un modèle bond graph, il est facile de vérifier que certaines variables inconnues sont non accessibles à partir des variables connues (mesurées). Par exemple, le flux thermique f_{36} , qui s'écoule du caloporteur, ne peut pas être calculé : ce sous-système n'est pas observable parce qu'il n'y a aucun capteur. En effet, en utilisant les propriétés causales du Bond Graph, la condition d'observabilité n'est pas satisfaite, l'élément dynamique C ne peut pas être inversé à la causalité dérivée.

Remarque : *Aucun défaut, qui peut affecter le caloporteur et le système de refroidissement, peut être détecté puisque ces sous-systèmes ne sont pas surveillables.*

Considérons la RRA candidate de la jonction 1_5 (Fig.5.8)

$$e_{29} + e_{30} - e_{28} = 0 \quad (5.33)$$

Toutes les variables inconnues sont accessibles à partir des variables connus. Les chemins causaux sont donnés par les lignes pointillées orientées dans un modèle de bond graph avec la

causalité inversée (capteur dual) dans la figure 5.23 (a). Ce chemin causal est lié à ce graphe orienté (Fig. 5.23 (b)).

Alors, la troisième RRA peut être facilement obtenue :

$$r_3 = \rho g L_{m1} - \left(\frac{F_{m1}}{R_s(u_1)} \right)^2 - P_{out} = 0 \quad (5.34)$$

avec Φ_{R_s} est la caractéristique de la vanne : $\dot{m}_{20} - R_s(u_1)\sqrt{(P_{20} - P_{out})} = 0$

Les sorties de l'algorithme de commande du régulateur de niveau u_1 et de la température du mélange réactionnel u_2 sont données par les équations suivantes:

$$u_1 = \Phi_{LC}(L_{ref}, L_{m1}), \quad u_2 = \Phi_{PID}(T_{ref}, T_{m1}) \quad (5.35)$$

où L_{ref} et T_{ref} sont les consignes de niveau et de température et Φ_{LC} et Φ_{PID} sont respectivement les lois de commande des régulateurs LC et PID .

Les contraintes relatives à la source hydraulique modulée et à la servo-vanne peuvent être mises sous la forme:

$$f_{65} = \Phi_{Pompe}(u_2), \quad f_{26} = \Phi_{Vanne}(u_1) \quad (5.36)$$

où Φ_{Pompe} et Φ_{Vanne} représentent respectivement les caractéristiques de la pompe et de la vanne de sortie.

Les RRAs, correspondant aux régulateurs, sont directement déduites des algorithmes de commande. Elles correspondent à la différence entre la sortie, supposée mesurée des régulateurs, et la sortie prédite fournie par l'algorithme de commande. Dans notre exemple, deux RRAs peuvent être générées:

$$r_4 = u_2 - \Phi_{PID}(T_{ref}, T_{m1}) \quad (5.37)$$

$$r_5 = u_1 - \Phi_{LC}(L_{ref}, L_{m1}) \quad (5.38)$$

La sortie d'actionneur liée à la relation précédente est écrite seulement en fonction des variables connues

$$r_6 = Fm_2 - \Phi_{Pompe}(u_2) \quad (5.39)$$

avec Φ_{Pompe} est la caractéristique de la pompe donnée par le constructeur ou bien identifiée expérimentalement à partir de la courbe graphique liant le flux et de la commande.

5.4.3 Analyse de la surveillabilité de l'installation

5.4.3.1 Signature des pannes

A partir du cahier de charges demandés, on peut fixer la liste des composants à surveiller. Il est évident que les performances du système de surveillance (concernant l'isolabilité) dépendent du nombre d'éléments à surveiller et des différences de leurs signatures de défaillance.

Pour construire la matrice des signatures, certains composants sont supprimés de la matrice lors qu'ils sont considérés comme infaillibles. Dans cette application, on suppose par exemple que la température de l'environnement n'est jamais défaillante et que les sorties des régulateurs sont toujours mesurées correctement.

La matrice de signature de défauts est déduite des équations de RRAs, où M_b et I_b représentent respectivement l'état de détectabilité et d'isolabilité du défaut sur chaque composant. Ils sont égaux à 1 lorsque le composant est surveillable, et 0 dans le cas contraire.

En se basant sur le vecteur binaire de chaque composant donné par le tableau 5.1, les lignes ne sont pas fortement différentes. Une panne sur le système de refroidissement et non surveillable. Toutes les autres fautes peuvent être détectées et isolées sauf la faute qui peut affecter $De : \mu_A$, $De : \mu_B$, $De : \mu_C$, $De : \mu_D$, $De : J_R$ et *Réac.Sec* (Réaction Secondaire) ou $Df : Fm_2$, et *Pompe*, ou $Sf : \dot{m}_A$, et $Sf : \dot{m}_B$: par conséquent leurs défaillances ne sont pas isolables. Par exemple, les signatures du capteur $Df : Fm_2$ et de la pompe sont identiques ($S = [0\ 0\ 0\ 0\ 0\ 1]$) ce qui signifie que les défaillances affectant ces composants ne peuvent pas être isolées.

Sept défauts peuvent être détectés et isolés : trois défauts capteurs, deux défauts systèmes (fuite dans le réservoir et la vanne) et deux défauts contrôleurs. L'apparition de la réaction secondaire peut être détectée mais non isolée. Les performances d'isolement peuvent être améliorées en ajoutant une redondance du capteur, par exemple l'utilisation des algorithmes optimaux.

5.4.3.2 Distance du Hamming

Afin d'évaluer le degré de localisation des défaillances, on calcule la distance de Hamming. Les distances entre les signatures reflètent la capacité de localisation entre différentes causes possibles. Pour permettre k erreurs au niveau de la décision, il faut que la distance minimale entre deux signatures de pannes soit de $2k + 1$. D'après le calcul (tableau 5.2), on peut remarquer que la distance entre les signatures de fautes est nulle. Cela signifie qu'il sera impossible de localiser une panne sur ces composants. On remarque également que dans la majorité des cas, cette distance est égale à 3. Donc, on ne peut pas localiser ces défaillances.

5.4.4 Résultats de simulation

5.4.4.1 Fonctionnement normal des résidus

En fonctionnement idéal, les résidus doivent être constamment nuls, Fig. 5.24. Ce n'est pas toujours le cas, car les erreurs de modélisation introduisent des résidus différents de zéro.

La première étape consiste à déterminer le seuil maximum qui correspond au fonctionnement normal en supposant que le bruit est normal (suit une distribution gaussienne). Les

	r ₁	r ₂	r ₃	r ₄	r ₅	r ₆	M _b	I _b
Sf:m _B	1	1	0	0	0	0	1	0
Sf:m _A	1	1	0	0	0	0	1	0
De:μ _A	1	0	0	0	0	0	1	0
De:μ _B	1	0	0	0	0	0	1	0
De:μ _C	1	0	0	0	0	0	1	0
De:μ _D	1	0	0	0	0	0	1	0
Réac. Sec	1	0	0	0	0	0	1	0
Df:Fm1	0	1	1	0	0	0	1	1
Df:Fm2	0	0	0	0	0	1	1	0
De:Lm ₁	0	1	1	0	1	0	1	1
De:Tm1	1	0	0	1	0	0	1	1
Pompe	0	0	0	0	0	1	1	0
Vanne	0	0	1	0	0	0	1	1
Réservoir	0	1	0	0	0	0	1	1
Sy.Ref	0	0	0	0	0	0	0	0
PID	0	0	0	1	0	0	1	1
LC	0	0	0	0	1	0	1	1
De:J _R	1	0	0	0	0	0	1	0

TAB. 5.1 – Matrice de signature de faute du système de surveillance de l'installation

résidus sont évalués en utilisant une approche statistique.

La moyenne \bar{m}_i ainsi que l'écart type S_i peuvent être calculés de la manière suivante *M. R. Spiegel (2002)* [176]:

$$\begin{cases} \bar{m}_i = \frac{1}{n} \sum i(k) \\ S_i = \left(\frac{1}{n} \sum (i(k) - \bar{m}_i)^2 \right)^{\frac{1}{2}} \end{cases} \quad (5.40)$$

	f1	f2	f3	f4	f5	f6	f7	f8	f9	f10	f11	f12	f13	f14	f15	f16	f17	f18
f1	0	0	1	1	1	1	1	1	3	2	2	3	3	1	2	3	3	1
f2		0	1	1	1	1	1	1	3	2	2	2	3	1	2	3	3	1
f3			0	0	0	0	0	3	2	3	1	2	2	2	1	2	2	0
f4				0	0	0	0	3	2	3	1	2	2	2	1	2	2	0
f5					0	0	0	3	2	3	1	2	2	2	1	2	2	0
f6						0	0	3	2	3	1	2	2	2	1	2	2	0
f7							0	3	2	3	1	2	2	2	1	2	2	0
f8								0	3	2	3	3	1	1	2	3	3	3
f9									0	3	2	0	2	2	1	2	2	2
f10										0	4	3	3	1	2	3	1	2
f11											0	3	3	3	2	1	3	1
f12												0	2	2	2	1	2	2
f13													0	2	1	2	2	2
f14														0	1	2	2	2
f15															0	1	1	1
f16																0	2	2
f17																	0	2
f18																		0

TAB. 5.2 – Distance du Hamming

La moyenne du paramètre représente sa valeur nominale, tandis que la valeur additive de l'incertitude Δi est une fonction de l'écart type S_i et dépend du niveau de confiance recherché.

Approximativement 68% des valeurs du paramètre i sont dans l'intervalle: $\bar{m}_i - S_i < i < \bar{m}_i + S_i$

Approximativement 95% des valeurs du paramètre i sont dans l'intervalle: $\bar{m}_i - 2S_i < i < \bar{m}_i + 2S_i$

Approximativement 99% des valeurs du paramètre i sont dans l'intervalle: $\bar{m}_i - 3S_i < i < \bar{m}_i + 3S_i$

avec n la longueur de la fenêtre d'observation.

Si le niveau de confiance choisi est de Δi , la valeur nominale du paramètre i_n ainsi que la valeur de l'incertitude additive Δi peuvent être estimées comme suit:

$$\begin{cases} i_n = \bar{m}_i \\ \Delta i = 3S_I \end{cases} \quad (5.41)$$

Afin de tester les performances du système de surveillance, on réalise sur MATLAB-SIMULINK un schéma de simulation des différents scénarios de fautes. A partir du modèle bond graph en causalité intégrale est généré (d'une façon systématique) le bloc diagramme de simulation.

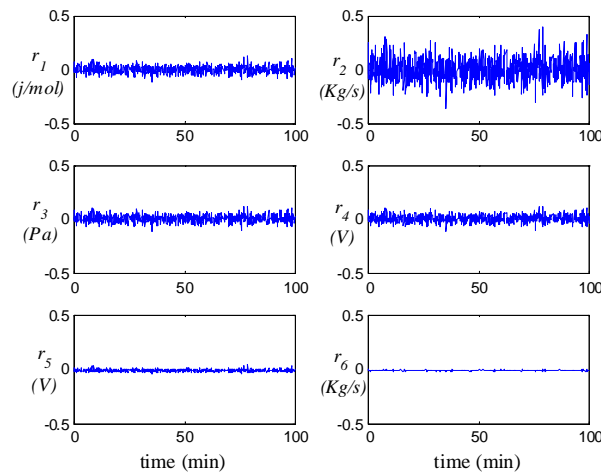


FIG. 5.24 – Réponse des résidus lors du fonctionnement normale

5.4.4.2 Scénarios de défaillances capteurs

On suppose que les signaux de capteur sont bruités; un bruit blanc est ainsi ajouté sur chaque mesure (l'amplitude du bruit est 2% de la valeur de sortie de chaque capteur). La figure 5.25 montre l'évolution des résidus numériques, en présence d'un changement brusque et constant de $5K$ durant un intervalle de temps allant de 50 min à 70 min sur le capteur de température ($De : Tm_1$). Le défaut capteur de température qui affecte deux résidus et génère une signature unique, $S = [1 \ 0 \ 0 \ 1 \ 0 \ 0]$, facile de le détecter et l'isoler. Les résidus r_1 et r_4 sont sensibles au défaut lié au capteur de température comme l'indique la figure 5.25.

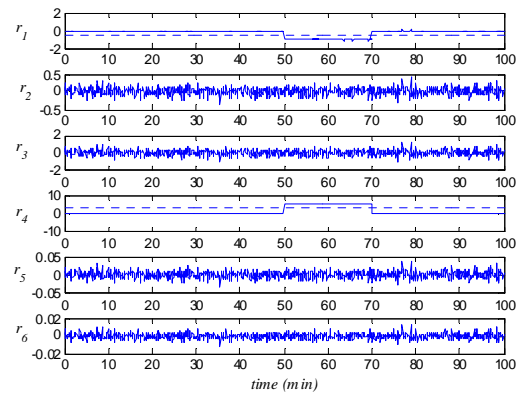


FIG. 5.25 – Réponse des résidus cas défaut au niveau capteur de température

5.4.4.3 Défaillances physiques sur le réacteur chimique

Afin de développer le système de détection de défaut, beaucoup de scénarios de défaillance ont été simulés. On a essayé de provoquer trois défauts physiques différents :

Scénario 1: *Fuite de mélange dans le réacteur* : une fuite de liquide durant un intervalle de temps allant de 50 min à 90 min (Fig. 5.26).

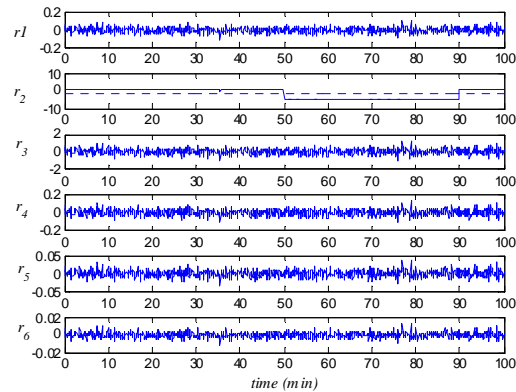


FIG. 5.26 – Réponse des résidus à la fuite

Scénario 2: *Augmentation de la perte thermique dans le caloporteur en introduisant un défaut de calorifugeage thermique*: pour ce scénario, 50 min après le début de la réaction, le système de refroidissement augmente de 6K (fig.5.27). Dans ce cas, l'évolution des indicateurs est donnée par la figure 5.27.

Cette augmentation de température provoque une accélération de la réaction, qui à son tour, augmente la puissance thermique de la réaction. La température du milieu réactionnel va

croître de plus en plus rapidement jusqu'à l'emballement de la réaction. A haute température, cet emballement s'accompagne de l'émission d'une phase gazeuse de plus en plus importante, résultant de la production de gaz de décomposition incondensables et/ou de l'augmentation de la tension de vapeur du mélange réactionnel. Lorsque la pression atteint la pression de rupture des parties les plus fragiles de l'enceinte contenant le milieu réactionnel (disque de rupture, équipements en verre,...), ces dernières sont susceptibles d'éclater en libérant brutalement une importante quantité d'énergie, ainsi que des produits éventuellement toxiques ou inflammables.

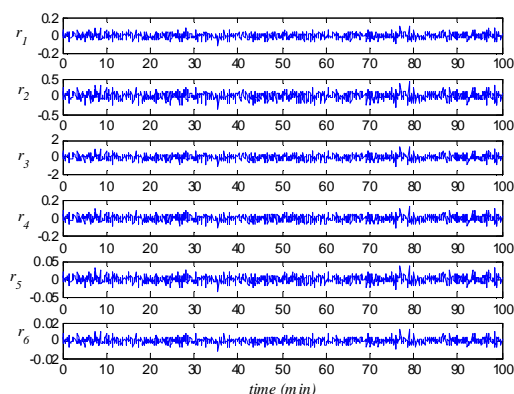


FIG. 5.27 – Réponse des résidus en cas de défaut dans le caloporteur

Le plus important de ce système de détection de défaillance est son critère approprié et robuste pour distinguer entre les situations dangereuses et non dangereuses. Alors, d'après l'évolution des résidus, on ne peut rien indiquer sur la situation puisque la défaillance de système de refroidissement est non détectable et non isolable (voir la matrice de signature donné par le tableau 5.1). Les conséquences d'une réaction d'emballement sont directement liées au potentiel thermique des réactions, c.-à-d., à l'énergie libérée. La probabilité d'éviter le déclenchement de ce type de réaction est liée à la capacité de la maintenir sous une commande désirée. Cela signifie que la probabilité dépend de l'évolution de la dynamique des espèces chimiques. Ainsi, la détermination de la macro-cinétique et de l'enthalpie des réactions principales et secondaires est exigée pour l'évaluation du potentiel des risques. L'analyse de sûreté de ce processus est souvent exécutée en établissant un scénario d'emballement du système chimique.

Scénario 3: Apparition des réactions secondaires: On suppose que le système de refroidissement n'est jamais défaillant et que les sorties des régulateurs et des capteurs soient toujours correctement mesurées. Une réaction secondaire se produit entre 70 et 80 *min* (cas de simulation), figure 5.28. En effet, pour bloquer l'évolution de la réaction secondaire et

éliminer ces effets en temps réel, il faut rajouter un réactif capable d'éliminer les produits indésirables. Sur la base des résultats de simulation obtenus, l'apparition de produit indésirable est parfaitement détecté par l'évolution du résidu r_1 . Les autres résidus confirment leurs insensibilités.

Pour les dernières décennies, la méthode de détection de défaut a été basée sur un essai appliqué à la température de la réaction, qui représente le paramètre à surveiller. Toute variation des paramètres et apparition de défaut (introduction d'un nouveau flux d'entrée, ou d'un flux de refroidissement, etc.) influent sur l'évolution de la température. Cette dernière donne une image sur la dynamique et l'absence (ou la présence) de défaut. D'ailleurs, la mesure de ce paramètre est disponible dans tous les réacteurs chimiques.

Afin d'expliquer le phénomène des réactions secondaires; par exemple, apparition du produit indésirable E qui modifie la dynamique de la réaction de synthèse. Le modèle de la réaction devient :

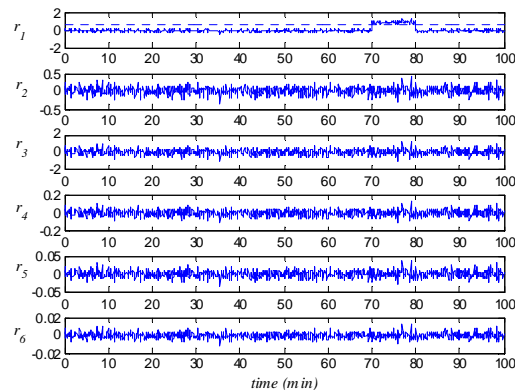
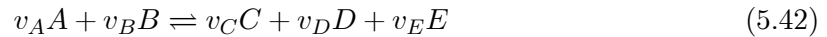


FIG. 5.28 – Réponse des résidus à l'apparition des réactions secondaires.

et par conséquent le bilan de matière et d'énergie ainsi que les indicateurs de défaut seront modifiés. Autrement dit, la RRA, r_1 (équation 5.27), ne prend pas en compte le terme $v_E \mu_{E,m}$. En conséquence, ces indicateurs ne sont pas « nuls ».

Dans ce cas, une augmentation de la température peut être signalée; elle est due à la présence de phénomènes exothermiques, transformations chimiques ou physiques dont la puissance calorifique n'est pas ou plus éliminée par un système de refroidissement. En d'autres termes, un emballement peut être produit et qui est le résultat d'une élimination de chaleur insuffisante comparée à la production de chaleur. Donc, le bilan thermique d'un réacteur

apparaît être l'élément (indicateur) important dans l'évaluation du risque inhérent à une réaction.

5.5 Conclusion

L'application proposée dans ce chapitre a permis de valider les modèles et tester l'algorithme de diagnostic développé dans les chapitres 2 et 3 sur un site réel du réacteur chimique. En effet, les performances de l'algorithme vis-à-vis des non détections et des retards dans la détection du défaut sont maîtrisées par une estimation a priori des valeurs détectables et des valeurs non détectables du défaut. Les résultats de simulation et d'expérimentation ont montrés les avantages de cette procédure de surveillance.

L'apparition de réactions secondaires dans des processus chimiques peut être considérée comme un modèle défaillant donc source d'apparition de la pollution ou de catastrophe technologique suite à la production de produits explosifs par exemple. Il serait complémentaire de traiter le cas des réacteurs à paramètres distribués, des bioréacteurs et des réacteurs nucléaires qui représentent une partie non négligeable en génie des procédés. Enfin, à long terme des problèmes liés à la commande tolérante aux fautes (FTC) sur la base de l'architecture graphique du modèle bond graph seront développées pour déterminer les conditions structurelles de reconfigurabilité qui peuvent être associées à l'existence de chemin sur le graphe suite à une défaillance donnée.

Conclusion générale et perspectives

1 Conclusion

Les travaux présentés dans ce mémoire ont apporté une contribution à la problématique générale de la supervision des réacteurs chimiques industriels en génie des procédés. Ce travail de recherche est réalisé dans le cadre d'une thématique globale pour la conception intégrée de systèmes de supervision à base de modèles bond graphs développé au sein de l'équipe Méthodes et Outils pour la Conception Intégrée des Systèmes (MOCIS) du LAGIS en collaboration avec l'Unité de Recherche Modélisation, Analyse et Commande des Systèmes (MACS) à Gabès.

L'objectif du travail de thèse est une contribution au développement générique des modèles déterministes et à paramètres incertains des réacteurs et des réactions chimiques à base de l'outil bond graph. Cet outil a servi pour la conception d'algorithmes de détection et localisation de défauts robustes aux incertitudes paramétriques grâce à ses propriétés comportementales, causales et structurelles et à la mise en œuvre d'indicateurs de défaillances au sein des systèmes rencontrés en génie des procédés complexes (en raison du couplage de plusieurs phénomènes), c'est-à-dire prenant en compte les phénomènes de conduction et convection thermiques, ainsi que les phénomènes de transfert de la matière et les phénomènes physico-chimiques (réactions chimiques et produits indésirables).

Le choix de la forme LFT pour la modélisation des incertitudes paramétriques avec les bond graphs a permis d'utiliser un seul outil pour la génération systématique d'indicateurs de défauts incertains formels. Ces incertitudes paramétriques sont explicitement introduites sur le modèle physique grâce à son architecture graphique, ce qui permet d'afficher clairement sur le modèle leurs origines.

Les RRAs incertaines générées sont bien structurées, faisant apparaître séparément l'apport énergétique des incertitudes aux indicateurs de défauts et facilitant leurs évaluations dans l'étape de décision par le calcul des seuils adaptatifs de fonctionnement normal. Les performances du diagnostic sont contrôlées par une analyse de la sensibilité des résidus aux incertitudes et aux défauts. L'indice de détectabilité des défauts est défini pour estimer a priori la valeur détectable d'un défaut, permettant ainsi de mesurer l'impact du défaut sur

un processus industriel. L'indice de sensibilité paramétrique est utilisé pour déterminer les paramètres qui ont le plus d'influence sur les résidus. D'un point de vue pratique, les champs d'applications de cette méthode sont très vastes grâce à l'aspect énergétique et multi physique des bond graphs, et à la forme LFT utilisée pour modéliser l'influence des incertitudes sur le système. La procédure développée est implémentée sur un outil logiciel afin d'automatiser la génération des modèles LFT et des RRAS incertaines.

Afin d'assurer la généralité des modèles, on a établi ainsi une base des modèles génériques de réacteurs incluant les phénomènes thermofluides et chimiques. Les modèles développés des réactions chimiques (réactions simples, réactions parallèles, réactions ramifiés...ect) et des réacteurs ont été classifiés en fonction du mode de fonctionnement, le nombre et le type de phases impliquées dans le réacteur (continu, discontinu...ect). Cette base de modèles est utilisée pour la construction de modèles dynamiques d'installations chimiques et pour fournir les conditions de surveillabilité du processus.

Nous nous sommes tout d'abord attachés à définir et à classer les différents composants pouvant constituer un système thermo-chimique. Cette approche nous a tout naturellement conduit à définir le système global comme un ensemble de sous-systèmes dont les modèles bond graphs, plus simples à réaliser, ont été étudiés séparément. Une démarche systématique grâce à un choix judicieux des variables de puissance et une modélisation modulaire a permis de modéliser des systèmes complexes (chaudière avec différentes configurations, condenseur, pompe, échangeur de chaleur, réacteur...). De plus ces modèles sont produits sous forme d'équations d'état plus adaptées pour la conception d'algorithmes de commande mais aussi pour la surveillance.

Les algorithmes proposés ont été validés en complétant un outil (FDIPad) développé par le laboratoire et qui consiste à automatiser les procédures de génération de modèles dynamiques formels sous forme d'équations d'état non linéaires à partir uniquement des Plans des Instrumentations Détaillés de l'installation (P&IDs). De plus ces modèles sont traités pour fournir les relations de redondances analytiques et les conditions de surveillabilité structurelle du procédé permettant ainsi de changer graphiquement l'architecture d'instrumentation pour améliorer la surveillabilité en fonction de cahiers de charges.

En se basant sur les études de surveillance à l'aide de l'outil bond graph multi-énergie, que nous avons étendu aux modèles chimiques (bond graphs multi-énergies non linéaires, faisant apparaître de nombreux couplages), nous avons développé une méthode générique et algorithmique de génération d'indicateurs de défauts sous forme symbolique prêts à être intégrés dans des systèmes de supervision. Ces relations, générées au niveau de chaque composant, permettent de rendre compte d'une défaillance de type capteur, actionneur ou physique (fuite, bouchage,...), tout en mesurant l'influence des autres composants. Un placement de capteur optimal permet de s'affranchir de cette influence. Ainsi, la localisation d'une défaillance au

sein du système est circonscrite au composant incriminé, ce qui limite grandement les manipulations de maintenance.

Bien que des techniques de surveillance sans modèle analytique existent, seuls les méthodes de surveillance avec modèle permettent une précision et une efficacité suffisante pour ce type de procédé à risques. C'est dans cette optique qu'une modélisation par bond graph a été choisie. Celle-ci permet, de part sa modularité, d'intégrer un niveau de précision optimal vis-à-vis du compromis entre véracité (le modèle décrit-il fidèlement le système?) et efficacité (un modèle trop complexe devient inutile). De plus, le caractère graphique de cet outil ouvre la porte à de nombreux résultats structurels issus de la théorie des graphes.

Différents aspects ont été abordés

- l'analyse structurelle du modèle, qui nous a conduit à proposer une méthode permettant de vérifier l'état du couplage (sur-déterminé ou sous-déterminé) directement sur le modèle bond graph.

- le développement d'une méthode de génération et d'évaluation des résidus, constituée de trois étapes:

- 1) Génération symbolique des RRAs incertaines à partir d'un modèle BG-LFT propre, observable et sur-déterminé, en utilisant les propriétés causales et structurelles de l'outil bond graph.

- 2) Génération de seuils adaptatifs de fonctionnement normal des résidus sous forme d'une enveloppe en utilisant les propriétés de la valeur absolue, permettant ainsi d'assurer la robustesse aux fausses alarmes.

- 3) Développement d'une méthode d'analyse de la sensibilité des résidus aux défauts et aux incertitudes dans le but de contrôler et d'améliorer les performances du diagnostic vis-à-vis des non détections et des retards dans la détection des défauts.

Ces résultats ont ensuite conduit à une implémentation informatique de la méthode proposée sur un logiciel dédié aux bond graphs, de l'étape de modélisation jusqu'à l'étape de génération des RRAs incertaines. Cette approche a été mise en oeuvre sur des applications en temps réel correspondant à des systèmes de dynamiques et de complexités différentes.

Pour mettre en évidence la contribution de l'approche bond graph par rapport aux autres méthodes quantitatives.

Un des avantages majeurs de l'approche bond graph développée dans ce manuscrit est qu'elle peut s'appliquer à des modèles non linéaires, à condition que l'on puisse faire apparaître explicitement l'incertitude paramétrique multiplicative dans les lois des composants.

Ces études ont été appliquées au site d'unité d'estérification présenté à l'ENIG.

2 Perspectives

Souvent les systèmes complexes sont non stationnaires, d'où la difficulté de développer des algorithmes de diagnostic couvrant toute leurs plages de fonctionnement. Le diagnostic robuste des systèmes non stationnaires est une thématique de perspective, qui peut être développée par une approche multi modèles. La difficulté dans ce genre d'approche se situe dans la transition discontinue entre les modèles qui génère de fausses alarmes.

Le pronostic est la deuxième thématique en perspective, car dans certains domaines comme le nucléaire et l'aéronautique, la détection de la présence d'une défaillance aussi précoce que possible ne peut que limiter les dégâts. Le challenge est donc de prévenir ces défaillances avant même qu'elles ne se manifestent, afin d'éviter tout danger sur les personnes et l'environnement.

Les outils développés dans ce rapport font apparaître plusieurs limites qui ouvrent des thèmes de recherche à développer:

- Dans la procédure de génération de RRAs, l'étude de l'existence de chemins entre un élément d'ensemble des variable inconnues et un élément d'ensemble des variable connues traduit les propriétés de surveillabilité structurelle du système en fournissant les séquences de calcul. L'existence des éléments multiports dans le modèle bond graph introduit nécessairement des sommets dans le graphe qui peuvent rassembler plusieurs sous-sommets d'où la nécessité d'utiliser un hypergraphe. Dans les processus en génie des procédés, il existe plusieurs possibilités de dépendances causales donc de calculabilité d'une variable à partir de la relation de structure (à cause du couplage des énergies), il y a alors apparition d'un problème combinatoire qui peut être résolu par l'introduction de critère multiples (physique, instrumentale, contrainte de complexité) en pondérant les arcs du multi-hypergraphe correspondant aux critères définis afin d'appliquer des algorithmes du plus courts chemin.

- Les modèles que nous avons considérés sont à paramètres localisés et par conséquent les défaillances détectées dépendent seulement du temps. Notre souhait est alors d'étendre les procédures développées dans ce mémoire aux processus représentés par des modèles à paramètres distribués (en utilisant toujours le bond graph comme outil). Ainsi, nous seront en mesure de détecter des défaillances dépendantes et du temps et de l'espace. La détection de fuites dans les gazoducs ou dans les réacteurs (qui sont décrits surtout par des EDPs) reste un domaine d'application privilégié pour lequel nous pourrions étendre notre approche.

- La méthodologie du diagnostic développée dans ce travail ont permis de mettre en évidence des difficultés d'application dans les systèmes où il y a transformation de la matière et pour lesquels les modèles sont souvent donnés sous forme empirique. L'application de la commande tolérante aux fautes sur cette complexité présentée dans les processus chimiques introduit une voie de recherche intéressante car elle s'inscrit dans le cadre de la protection de l'environnement.

- Le développement d'une méthode d'analyse de la sensibilité des résidus aux défauts

et aux incertitudes dans le but de contrôler et d'améliorer les performances du diagnostic vis-à-vis des non détections et des retards dans la détection des défauts.

Bibliographie

- [1] F. Couenne, C. Jallut, B. Maschke, P.C. Breedveld, and M. Tayakout. Bond graph modelling for chemical reactors. *Math. Comput. Modell. Dyn. Syst.*, 12:159, 2006.
- [2] A. K. Samantaray and B. Ould-Bouamama. *Model-Based Process Supervision. Bond Graph Approach*. Springer Verlag, 2008.
- [3] B. Ould-Bouamama, M. Staroswiecki, and A.K. Samantaray. Software for supervision system design in process engineering industry. In *In Process Engineering Industry. 6th IFAC, SAFEPROCESS*, pages 691–695, Beijing, China, 2006.
- [4] Kchaou N., Elloumi J., Drira Z., Hamza A., Ayadi H., Bouain A., and L. Aleya. Distribution of ciliates in relation to environmental factors along the coastline of the gulf of gabes, tunisia. *Estuarine, Coastal and Shelf Science*, 83:414–424, 2009.
- [5] A. Orantes, T. Kempowsky, M.-V. Le Lann, and J. Aguilar-Martin. A new support methodology for the placement of sensors used for fault detection and diagnosis. *Chemical Engineering and Processing: Process Intensification*, 47:330–348, 2008.
- [6] F.P. Less. *Loss Prevention in the Process Industries Hazard Identification, Assessment and Control*. Butterworth and Heinemann edition, UK, 1996.
- [7] E.M. Assaf, R.C. Giordano, and C.A. Nascimento. Thermal runaway of ethylene oxidation reactors: Prevision through neural networks. *Chemical engineering science*, 3:107–112, 1996.
- [8] J.C. Hoskins and D.M. Himmelblau. Artificial neural network models of knowledge representation in chemical engineering. *Computers Chemical Engineering*, 12:881–890, 1988.
- [9] P.M. Frank. Fault diagnosis in dynamic systems using analytical and knowledge based redundancy- a survey and some new results. *Automatica*, 26:459–474, 1990.
- [10] G. Paviglianiti and F. Pierri. Observer-based actuator fault detection for chemical batch reactors: A comparison between nonlinear adaptive and h_∞-based approaches. 2007.
- [11] F. Caccavale, F. Pierri, M. Lamarino, and V. Tufano. An integrated approach to fault diagnosis for a class of chemical batch processes. *Journal of process control*, 19:827–841, May 2009.

-
- [12] H.M. Paynter. *Analysis and Design of Engineering Systems*. M.I.T. Press, 1961.
- [13] D. Karnopp, D. Margolis, and R. Rosenberg. *Systems Dynamics: A Unified Approach*. John Wiley and Sons, New York, 2000.
- [14] D. Linkens and H. Wang. Qualitative bond graph reasoning in control engineering. ii. fault diagnosis. In *Proceedings of the 1995 Western Multiconference ICBGM'95*, pages 189–194, 1995.
- [15] C. Ghiaus. Fault diagnosis of air conditioning systems based on qualitative bond graph. *Energy and buildings*, 30:221–232, 1999.
- [16] B. Ould Bouamama. Detailed specifications of toolbox interactions used for steam generator supervision. Technical report, Contrat IMS CHEM, IFP Paris, 2002.
- [17] E. Craye, A.L. Gehin, B. Ould Bouamama, M. Staroswiecki, and A. Toguyeni. Analyse du système de réfrigération intermédiaire (SRI) et filtrage d'alarmes. partie II: Traitement des alarmes du SRI par les modèles externes et bond graphs. Technical report, Contrat EDF-LAIL P31/BO2970/EP885, 1998.
- [18] A. K. Samantaray, K. Medjaher, B. Ould Bouamama, M. Staroswiecki, and G. Dauphin-Tanguy. Diagnostic bond graphs for online fault detection and isolation. *Simulation Modelling Practice and Theory*, 14:237–262, 2006.
- [19] W. EL OSTA. *Surveillabilité Structurelle et Platitude Pour Le Diagnostic Des Modèles Bond Graph Couplés*. PhD thesis, Laboratoire d'Automatique et Informatique Industrielle de Lille, USTL, 2005.
- [20] B. Ould Bouamama, M. Staroswiecki, and A.K. Samantaray. 'software for supervision system design in process engineering. pages 691–695, 2006.
- [21] M. A. Djeziri, B. Ould Bouamama, and R. Merzouki. Modeling and robust FDI of steam generator using uncertain bond graph model. *Journal of Process Control*, 19:149–162, 2009.
- [22] J. P. Gupta. Bhopal gas tragedy and its effects on process safety. *Journal of Loss Prevention Process Industries*, 18:195–196, 2005.
- [23] J.L. Gustin. How the study of accident case histories can prevent runaway reaction accidents from recurring. *Trans IchemE*, 80:16–24, 2002.
- [24] T.A. Kletz. Accident investigation: Keep asking "why?". *Journal of Hazardous Materials*, 130:69–75, 2006.
- [25] Direction Des Risques Accidentels. Etude bibliographique relative au développement de réactions chimiques non contrôlées dans l'industrie. Technical report, Institut National de l'Environnement Industriel et des Risques (INERIS), juin 2000.
- [26] V. Venkatasubramanian, R. Rengaswamy, K. Yin, and S.N. Kavuri. A review of process fault detection and diagnosis. part i: Quantitative model-based methods. *Computers and Chemical Engineering*, 27:293–311, 2003.

-
- [27] V. Venkatasubramanian, R. Rengaswamy, and S.N. Kavuri. A review of process fault detection and diagnosis. part 2: Qualitative models and search strategies. *Computers and Chemical Engineering*, 27:313–326, 2003.
- [28] V. Venkatasubramanian, R. Rengaswamy, K. Yin, and S.N. Kavuri. A review of fault detection and diagnosis. part 3: Process history based methods. *Computers and Chemical Engineering*, 27:327–346, 2003.
- [29] H. Schuler and C.U. Schmidt. Calorimetric-state estimators for chemical reactor diagnosis and control: Review of methods and applications. *Chemical Engineering Science*, 47:399–409, 1992.
- [30] L. Balland, N. Mouhab, S. Alexandrova, and J.M. Cosmao. Determination of kinetic and energetic parameters of chemical reactions in a heterogeneous liquid/liquid system. *Chem. Eng. Tech*, 22:321–329, 1999.
- [31] S. K. Dash, R. Rengaswamy, and V. Venkatasubramanian. Fault diagnosis in a nonlinear CSTR using observers. In *In Proceedings of the 2001 Annual AIChE Meeting*, Reno, 2001.
- [32] O.A.Z. Sotomayor and D. O.A.Z. Odloak. Observer-based fault diagnosis in chemical plants. *Chemical Engineering Journal*, 112:93–108, 2005.
- [33] R. Tarantino, F. Szigeti, and E. Colina-Morles. Generalized luneberger observerbased fault detection filter design: An industrial application. *Control Engineering Practice*, 8:665–671, 2000.
- [34] S. Rajaraman, J. Hahn, and M. SamMannan. Sensor fault diagnosis for nonlinear processes with parametric uncertainties. *Journal of Hazardous Materials*, 130:1–8, 2006.
- [35] L. Balland, N. Mouhab, J.M. Cosmao, and L. Estel. Kinetic parameter estimation of solvent-free reactions: Application to esterification of acetic anhydride by methanol. *Chemical Engineering and Processing*, 41:395–402, 2002.
- [36] Y. Chetouani. Fault detection in a chemical reactor by using the standardized innovation. *Process Safety and Environmental Protection*, 84:27–32, 2006.
- [37] A. S. Willsky, E.Y. Chow, S.B. Gershwin, C.S. Greene, P.K. Houpt, and A.L. Kurkjan. Dynamic model-based techniques for the detection of incidents on freeways. *Transaction Automatic Control*, 25:347–360, 1980.
- [38] J. Villiermaux. *Génie de la Réaction Chimique, Conception et Fonctionnement Des Réacteurs*. Technique et Documentation Lavoisier, Paris, 1993.
- [39] L. Balland, L. Estel, J.M. Cosmao, and N. Mouhab. A genetic algorithm with decimal coding for the estimation of kinetic and energetic parameters. *Chemometrics Intelligent Laboratory Systems*, 50:121–135, 2000.
- [40] L. H. Chiang, E. L. Russell, and R. D. Braatz. *Fault Detection and Diagnostic in Industrial Systems*. Springer, U.K, 2001.

-
- [41] A.M. Benkouider and Y. Chetouani. Identification paramétrique ARMAX d'un réacteur chimique. *Récents Progrès en Génie des Procédés*, 92, 2005.
- [42] C. Commault, J.M. Dion, and S.Y. Agha. Structural analysis for the sensor location problem in fault detection and isolation. *Automatica*, 44:2074–2080, 2008.
- [43] P.J. Mosterman and G. Biswas. Diagnosis of continuous valued systems in transient operating regions. *IEEE Trans. on Systems, Man and Cybernetics*, 29(6):554–565, 1999.
- [44] M.R. Maurya, R. Rengaswamy, and V. Venkatasubramanian. A signed directed graph-based systematic framework for steady-state malfunction diagnosis inside control loops. *Computers and Chemical Engineering*, 61:1790–1810, 2006.
- [45] H. Vedam and V. Venkatasubramanian. Signed digraph based multiple fault diagnosis. *Computers Chem. Engineering*, 21:655–660, 1997.
- [46] M. Iri, K. Aoki, E. O'Shima, and H. Matsuyama. An algorithm for diagnosis of system failures in the chemical process. *Computers Chemical Engineering*, 3:489–493, 1979.
- [47] M.R. Maurya, R. Rengaswamy, and V. Venkatasubramanian. A systematic framework for the development and analysis of signed digraphs for chemical processes. 1. algorithms and analysis. *Ind. Eng. Chem. Res.*, 42 (20):4789–4810, 2003.
- [48] M.R. Maurya, R. Rengaswamy, and V. Venkatasubramanian. A systematic framework for the development and analysis of signed digraphs for chemical processes. 2. control loops and flowsheet analysis. *Industrial Engineering Chemistry Research*, 42(20):4811–4827, 2003.
- [49] M.R. Maurya, R. Rengaswamy, and V. Venkatasubramanian. A signed directed graph and qualitative trend analysis-based framework for incipient fault diagnosis. *Chemical Engineering Research and Design*, 85(10):1407–1422, 2007.
- [50] M. R. Maurya, R. Rengaswamy, and V. Venkatasubramanian. Application of signed digraphs-based analysis for fault diagnosis of chemical process flowsheets. *Engineering Applications of Artificial Intelligence*, 17:501–518, 2004.
- [51] R. Vaidyanathan and V. Venkatasubramanian. Digraph-based models for automated HAZOP analysis. *Reliable Engineering Systems Safety*, 50:33–49, 1995.
- [52] N. Wilcox and V. Himmelblau. The possible cause-effect graphs (PSEG) model for fault diagnosis-I. methodology. *Computers and Chemical Engineering*, 18:103–116, 1994.
- [53] N. Wilcox and D. Himmelblau. The possible cause-effect graphs (PSEG) model for fault diagnosis-II. applications. *Computers and Chemical Engineering*, 18:117–127, 1994.
- [54] C. Palmer and P. Chung. Creating signed directed graph models for process plants. *Industrial and Engineering Chemistry Research*, 39:2548–2558, 2000.
- [55] D. Nam, C. Han, C. Jeong, and E. Yoon. Automatic construction of extended symptom-fault associations from the signed digraph. *Computers and Chemical Engineering*, 20:605–610, 1996.

-
- [56] M. Bhushan and R. Rengaswamy. Design of sensor network based on the signed directed graph of the process for efficient fault diagnosis. *Industrial and Engineering Chemistry Research*, 39:999–1019, 2000.
- [57] M. Bhushan and R. Rengaswamy. Comprehensive design of a sensor network for chemical plants based on various diagnosability and reliability criteria: 2. applications. *Industrial and Engineering Chemistry Research*, 41:1840–1860, 2002.
- [58] J. Chen and J. Howell. A self-validating control system based approach to plant fault detection and diagnosis. *Computers and Chemical Engineering*, 25:337–358, 2001.
- [59] G. Lee, S. Song, and E. Yoon. Multiple-fault diagnosis based on system decomposition and dynamic PLS. *Industrial and Engineering Chemistry Research*, 42:6145–6154, 2003.
- [60] M.R. Maurya, R. Rengaswamy, and V. Venkatasubramanian. Systematic development and application of digraphs for process diagnosis and hazards analysis. In *Stephanopoulos, G., Romagnoli, J.A., Yoon, E.S., (Eds.), 4th IFAC Workshop on On-Line Fault Detection and Supervision in the Chemical Process Industries (CHEMFAS-4)*, pages 327–332. Korea, June 7-8, 2001.
- [61] K. Hangos and Z. Tuza. Optimal control structure selection for process systems. *Computers and Chemical Engineering*, 25:1521–1536, 2001.
- [62] R. Li and X. Wang. Qualitative/quantitative simulation of process temporal behavior using clustered fuzzy digraphs. *AIChE Journal*, 47:906–919, 2001.
- [63] X. Wang, B. Chen, S. Yang, and C. McGreavy. Neural nets, fuzzy sets and digraphs in safety and operability studies of refinery reaction processes. *Computers and Chemical Engineering*, 21:2169–2178, 1996.
- [64] B. Ould Bouamama, M. Redfoe, M. Bayart, M. Samantary, and B. Coarea. FDI of smart actuators using bond graph and external models. *Computers and Engineering Practice*, 13:139–175, 2004.
- [65] E.M. Assaf, R.C. Giordano, and C.A. Nascimento. Thermal runaway of ethylene oxidation reactors: Prevision through neural networks. *Chemical engineering science*, 3:107–112, 1996.
- [66] D. Neogi and C.E. Schlags. Multivariate statistical analysis of an emulsion batch process. *Industrial Engineering and Chemistry Research*, 44:1596–1610, 1998.
- [67] J. Zhang, E.B. Martin, and A.J. Morris. Fault detection and diagnosis using multivariate statistical techniques. *Transactions of IChemE 74A*, 74A:89–96, 1996.
- [68] J.G. Chen, J.A. Bandoni, and J.A. Romagnoli. Robust PCA and normal region in multivariate statistical process monitoring. *AIChE Journal*, 42:3563–3566, 1996.
- [69] P. Nomokos and J. MarcGregor. Monitoring batch processes using multiway principal component analysis. *American Institute of chemical engineers journal*, 40:1361–1375, 1994.

-
- [70] J. F. MarcGregor and T. Kourti. Statistical process control of multivariate processes. *Control engineering practice*, 3:403–414, 1995.
- [71] J.A. Barton. Runway reactions in batch reactors, the protection of exothermic reactors and pressurized storage vessels congress. *Institution of Chemical Engineers*, pages 11–15, 1984.
- [72] J. L. Gustin. Retour d’expérience chimie fine. Technical report, Recommandations du Ministère de l’environnement, Union des Industries Chimiques, UIC-Edition, Paris, 1996.
- [73] D.L. Yu, J.B. Gomm, and D. Williams. Sensor fault diagnosis in a chemical process via RBF neural networks. *Control Engineering Practice*, 7:49–55, 1999.
- [74] A.F. Cubillos and L.E. Lima. Adaptive hybrid neural models for process control. *Computers Chemical Engineering*, 22:989–992, 1998.
- [75] Y. Power and A.P. Bahri. A two-step supervisory fault diagnosis framework. *Computers Chemical Engineering*, 28:2131–2140, 2004.
- [76] V. Venkatasubramanian, R. Vaidyanathan, and Y. Yamamoto. Recess fault detection and diagnosis using neural networks-i steady state process. *Computers and Chemical Engineering*, 14:699–712, 1990.
- [77] K. Watanabe, S. Hirota, L. Hou, and D.M. Himmelblau. Diagnosis of multiple simultaneous fault via hierarchical artificial neural networks. *AIChE Journal*, 40:839–848, 1994.
- [78] P. Hugo, J. Steinbach, and F. Stoessel. Calculation of the maximum temperature in stirred tank reactors in case of a breakdown of cooling. *Chemical Engineering Science*, 43:2147, 1988.
- [79] P. M. Frank, S. X. Ding, and T. Marcu. Model-based fault diagnosis in technical process. *Transactions of the Institution of Measurement and Control*, 22:57–101, 2000.
- [80] M. A. Kramer and R. S. H. Mah. Model-based monitoring. In *Proceedings of the Second International Conference on Foundations of Computer-Aided Process Operations (FOCAPO)*, pages 45–68, 1993.
- [81] S. Lafortune and E. Chen. A relational algebraic approach to the representation and analysis of discrete-event systems. In *Proceedings of the American Control Conference*, pages 2893–2898, Boston, MA, 1991.
- [82] M. Sampath, R. Sengupta, S. Lafortune, K. Sinnamohideen, and D. Teneketzis. Failure diagnosis using discrete-event models. *IEEE Transactions on Control Systems*, 4:105–124, 1994.
- [83] S. Dash, R. Rengaswamy, and V. Venkatasubramanian. Uzzy-logic based trend classification for fault diagnosis of chemical processes. *Computers and Chemical Engineering*, 27:347–362, 2003.

-
- [84] E. Mamdani. Application of fuzzy logic to approximate reasoning using linguistic system. *Fuzzy sets and systems*, 26:1182–1191, 1977.
- [85] T. Takagi and M. Sugeno. Fuzzy identification of systems and its application to modelling and control. *IEEE Transactions on systems, man and cybernetics*, 15:116–132, 1985.
- [86] A. Laurent. *Sécurité Des Procédés Chimiques, Connaissance de Base et Méthodes D'analyse de Risques*. TecDoc. Lavoisier, Paris, 2003.
- [87] A. K. Coker. *Modeling of Chemical Kinetics and Reactor Design*. Gulf Professional Publishing, 2001.
- [88] A.E.P. Brown. Risk analysis: An investment in engineering. *Process Safety Progress*, 18:121–125, 1999.
- [89] J. Tixier, G. Dusserre, O. Salvi, and D. Gaston. Review of 62 risk analysis methodologies of industrial plants. *Journal of Loss Prevention Process Industries*, 15:291–303, 2002.
- [90] F.I. Khan and P.R. Amyotte. How to make inherent safety practice a reality. *Canadian Journal of Chemical Engineering*, 81:2–16, 2003.
- [91] H. Lawley. Operating study and hazard analysis. *Chemical Engineering Progress*, 4:45–56, 1974.
- [92] AFNOR. Techniques de l'analyse de la fiabilité des systèmes - procédures d'analyse des modes de défaillances et de leur effets (amde). Technical report, Norme nf x 60 510, 1986.
- [93] W. Regenass. The development of stirred-tank heat flow calorimetry as a tool for process optimisation and process safety. *Chimia*, 51:189–200, 1997.
- [94] F. Stoessel. Application of reaction calorimetry in chemical engineering. *Journal of Thermal Analysis*, 49:1677–1688, 1997.
- [95] J. Steinbach. *Safety Assessment for Chemical Processes*. Wiley-VCH, 1999.
- [96] F. Stoessel. What is your thermal risk. *Chemical Engineering Progress*, pages 68–75, 1993.
- [97] E. Frisk, M. Krysander, and J. Åslund. Sensor placement for fault isolation in linear differential-algebraic systems. *Automatica*, 45:364–371, 2009.
- [98] M. Blanke, M. Kinnaert, J. Lunze, and M. Staroswiecki. *Diagnosis and Fault-Tolerant Control*. Springer-Verlag, Heidelberg, 2003.
- [99] M. Blanke and T. Lorentzen. SATOOL - a software tool for structural analysis of complex automation systems. In *Dans IFAC Safeprocess Conference*, Beijing, China, 2006.
- [100] L. Travé-Massuyès, T. Escobet, and X. Olive. Diagnosability analysis based on com-

- ponent supported analytical redundancy relations. *IEEE Transactions*, 36:1146–1160, 2006.
- [101] M. Krysander, J. Aslund, and M. Nyberg. An efficient algorithm for finding minimal overconstrained subsystems for model-based-diagnosis. *IEEE Transactions on systems, Man, and Cybernetics-Part A : Systems and Humans*, 38:197–206, 2008.
- [102] A. A. Yassine, S. Ploix, and J. Flaus. New results for sensor placement with diagnosability purpose. In *18th International Workshop on Principles of Diagnosis (DX-07)*, Nashville, USA, 2007.
- [103] B. Pulido and Alonso C. Possible conflicts, ARRs, and conflicts. In *In the Thirteenth International Workshop on Principles of Diagnosis, DX-2002*, pages 122–127, Semmering, Austria, 2002.
- [104] B. Pulido and C. Alonso. Possible conflicts: A compilation technique for consistency-based diagnosis. *IEEE Transactions on Systems, Man, and Cybernetics*, 34:1083–4419, 2004.
- [105] L. Travé-Massuyès and R. Escobet, T. and Milne. Model-based diagnosability and sensor placement application to a frame 6 gas turbine subsystem. In *In International Joint Conference on Artificial Intelligence IJCAI'01*, pages 551–556, USA, 2001.
- [106] L. Travé-Massuyès, T. Escobet, and S. Spanache. Diagnosability analysis based on component supported analytical redundancy relations. In *In SAFEPROCESS'2003*, Washington D.C, U.S.A., 2003.
- [107] M. Krysander and M. Nyberg. An efficient algorithm for finding overconstrained subsystems for construction of diagnostic tests. California, USA, 2005. the 16th International Workshop on Principles of Diagnosis, DX-05.
- [108] M. Nyberg and M. Krysander. Combining AI, FDI, and statistical hypothesis testing in a framework for diagnosis. In *SAFEPROCESS'2003*, Washington DC, USA., 2003.
- [109] E. Frisk, D. DÅustegor, D. Krysander, and V. Cocquemot. Improving fault isolability properties by structural analysis of faulty behavior models : Application to the DAMADICS benchmark problem. In *IFAC SAFEPROCESS Symposium*, Washington, D.C. U.S.A., 2003.
- [110] S. Ploix, M. Desinde, and S. Touaf. Automatic design of detection tests in complex dynamic systems. In *In The 16th IFAC World Congress*, Prague, Czech republic, 2005.
- [111] R.J. Patton and J. Chen. Robust fault detection using eigen structure assignment : A tutorial consideration and some new results. In *In Proceedings of the 30th IEEE Conference on Decision and Control*, 1991.
- [112] P.M. Frank and X. Ding. Survey of robust residual generation and evaluation methods in observer-based fault detection systems. *Journal of Process Control*, 7(6):403–424, 1997.

-
- [113] T. Kohda, H. Katsube, H. Fujihara, and K. Inoue. Identification of system failure causes using bond graph models. international conference on systems. *Man and Cybernetics. Conference Proceedings*, 5:269–274, 1993.
- [114] D. Henry, A. Zolghari, F. Gastang, and M. Monsion. A new multi-objective filter design for guaranteed robust FDI performance. pages 173–178, Orlando, Florida, USA, 2001. the 40th IEEE Conference on Decision and Control.
- [115] M. Basseville. On-board element fault detection and isolation using the statistical local approach. *Automatica*, 34:1359–1373., 1998.
- [116] R. Dorr, F. Kratz, J. Ragot Loisy, and J.L. Germain. Detection, isolation and identification of sensor faults in nuclear power plants. *IEEE Transactions on Control Systems Technology*, 5, 1997.
- [117] C. Sié Kam and G. Dauphin-Tanguy. Bond graph models of structured parameter uncertainties. *Journal of the Franklin Institute*, 342:379–399, 2005.
- [118] W. Borutzky and G. Dauphin-Tanguy. Incremental bond graph approach to the derivation of state equations for robustness study. simulation. *Modelling Practice Theory*, 12:41–60, 2004.
- [119] M.A. Djeziri, R. Merzouki, B. Ould Bouamama, and G. Dauphin Tanguy. Bond graph model based for robust fault diagnosis. In *In: Proceedings of the 2007 American Control Conference*, pages 3017–3022, New York, USA, 2007. in: Proceedings of the 2007 American Control Conference.
- [120] R. El Harabi, B. Ould Bouamama, M. El Koni Ben Gayed, and M.N. Abelkrim. Pseudo bond graph for fault detection and isolation of an industrial chemical reactor, part i: Bond graph modeling. In *9th International Conference on Bond Graph Modeling and Simulation*. 11 - 16 Avril 2010, Orlando, Florida, pp. 180-189. ISBN 978-1-61738-209-3., 2010.
- [121] R. El Harabi, B. Ould Bouamama, M. El Koni Ben Gayed, and M.N. Abelkrim. Pseudo bond graph for fault detection and isolation of an industrial chemical reactor, part II: FDI system design. In *9th International Conference on Bond Graph Modeling and Simulation*, pages pp. 190–197. 11 - 16 Avril 2010, Orlando, Florida. ISBN 978-1-61738-209-3, 2010.
- [122] O. Levenspiel. *Chemical Reaction Engineering*. John Wiley and Sons, 1999.
- [123] J.U. Thoma. *Introduction to Bond Graphs and their Applications*. Pergamon Press, Oxford; New York, 1975.
- [124] F. Couenne, C. Jallut, B. Maschke, P.C. Breedveld, and M. Tayakout. Bond graph for dynamic modelling in chemical engineering. *Chemical Engineering and Processing*, 47:1994–2003, 2008.

-
- [125] C. Heny, D. Simanca, and M. Delgado. Pseudo-bond graph model and simulation of a continuous stirred reactor. *Journal Of The Franklin Institue*, 337:21–42, 1999.
- [126] J. Thoma and B. Ould Bouamama. *Modelling and Simulation in Thermal and Chemical Engineering: A Bond Graph Approach*. Springer Engineering, ISBN 3-540-66388-6., 1999.
- [127] B Ould Bouamama. Model builder for thermo-fluid systems using a bond graph and functional modelling. pages 822–826, Marseille, France, 2001. Proceedings of 13th European Simulation Symposium, ESS01.
- [128] A.R. Khaled, B.O. Bouamama, and A. Nakrachi. Generic bond graphs procedure for chemical reactions modelling , computational engineering in systems applications. *IMACS IEEE "CESA '06"*, 1:412–417, 2006.
- [129] F. E. Cellier. *Continuous System Modelling*. Springer Verlag, New York, 1991.
- [130] A. P. G. F. Oster. Chemical reaction networks. *IEEE TRANSACTION ON CIRCUITS AND SYSTEMS*, 21, 1974.
- [131] L. John and J. Wyatt. Network representation of reaction diffusion sytems far from equilibrium. *Computer Programs in biomedicine*, 8:180–195, 1978.
- [132] G Falk. *Energie and Entropie*. Springer Verlag, 1976.
- [133] G Job. *Die Werte Des Chemischen Potentials*. SchroedelVerlag, Hannover, 1981.
- [134] J. Thoma. Thermofluid systems by multi-bondgraphs. *Journal of Franklin Institute*, 329:999–1009, 1992.
- [135] D.C. Karnopp and S. Azerbaijani. Pseudo bond graphs for generalised compormental models in engineering and physiology. *Journal of The Franklin Institute*, 312(2):95–108, 1981.
- [136] D. Karnopp. Bond graphs models for electrochemical energy storage-electrical chemical effects. *Journal of The Franklin Institute*, 327:983–992, 1990.
- [137] M. A. Djeziri. *Diagnosctic Des Systèmes Incertains Pour L'approche Bond Graph*. PhD thesis, Université des sciences et Technologies de Lille, France, 2007.
- [138] D. Henry and A. Zolghari. Norm-based design of robust FDI schemes for uncertain systems under feedback control: Comparison of two approaches. *Control engineering practice*, 14:1081–1097, 2006.
- [139] D. Alazard, C. Cumer, P. Apkarian, M. Gauvrit, and G. Fereres. *'Robustesse et Commande Optimale*. Cépadues-Editions ISBN. 2.85428.516.6., 1999.
- [140] C. Sié Kam and G. Dauphin-Tanguy. Bond graph tool for standard interconnection structure determination. pages 33–40, Phoenix-Arizona. USA, 2001. WMC SCS ICBGM 2001.
- [141] R. Redheffer. On a certain linear fractional transformation. *EMJ. Maths and physics*, 39:269–286, 1960.

-
- [142] C. Sueur and G. Dauphin-Tanguy. Structural controllability and observability of linear systems represented by bond graphs. *Journal of Franklin Institute*, 326:869–883, 1989.
- [143] R. El Harabi, B. Ould Bouamama, M. El Koni Ben Gayed, and M.N. Abelkrim. Robust fault dagnosis on chemaical system by using uncertain bond graph model. In *8th IEEE International Multi-Conference on Systems, Signals and Devices SSD2011*, page 82, Sousse, Tunisie, 2011.
- [144] A. Perelson and J. F. Oster. Chemical reaction dynamics, part ii: Reaction networks. *Archive for Rational Mechanics and Analysis*, 57:31–98, 1975.
- [145] F. Stoessel. *Thermal Safety of Chemical Processes: Risk Assessment and Process Design*. Wiley-VCH, 2008.
- [146] B. Martel. *Chemical Risk Analysis*. Taylor Francis, 2000.
- [147] A. Benuzzi and J. M. Zaldivar. *Safety of Chemical Batch Reactors and Storage Tanks*. Springer, 1991.
- [148] R. El Harabi, B. Ould Bouamama, M. El Koni Ben Gayed, and M.N. Abelkrim. FDI of chemical process using bond graph tool,. In *14th IEEE IFAC International Conference on Methods and Models in Automation and Robotics*. 19 - 21 August, Miedzyzdroje, Poland., 2009.
- [149] S. Rimaux. *Etude Des Propriétés Structurelles de Certaines Classes de Systèmes Physiques Non Linéaires Modélisés Par Bond Graph*. PhD thesis, Université de Lille, France, 1995.
- [150] M. Khemliche, B. Ould Bouamama, and H. Haffaf. Sensor placement for component diagnosability using bond-graph. *Sensors and Actuators A*, 132:547–556, 2006.
- [151] B. Ould Bouamama. *Modélisation et Supervision Des Systèmes En Génie Des Procédés, Approche Bond Graph*. PhD thesis, Université des Sciences et Technologies de Lille, France, 2002.
- [152] D. J. Murray-Smith. Investigations of methods for the direct assessment of parameter sensitivity in linear closed-loop control systems. *Transactions on Scientific Computation*, 4:323–328, 1986.
- [153] M. A. Manness and D. J. Murray-Smith. Direct assessment of parameter sensitivity in multivariable closed-loop systems. pages 149–183, Ghent, Belgium, 1987. Proceedings of 1987 UKSC Conference on Computer Simulation.
- [154] D. J. Murray-Smith, J. Kocijan, and M. Gong. A signal convolution method for estimation of controller parameter sensitivity functions for tuning of feedback control systems by an iterative process. *Control Engineering Practice*, 11:1087–1094, 2003.
- [155] O. Adort, D. Maquin, and J. Ragot. 'fault detection with model parameter structured uncertainties. European Control Conference ECC'99, 1999.

-
- [156] A. Johansson, M. Bask, and T. Norlander. Dynamic threshold generators for robust fault detection in linear systems with parameter uncertainty. *Automatica*, 42:1095–1106, 2006.
- [157] X. G. Yan and C. Edwards. Nonlinear robust fault recognition and estimation using a sliding mode observer. *Automatica*, 43:1605–1614, 2007.
- [158] W. R. Perkins and J. B. Cruz. *Sensitivity Methods in Control Theory*. Pergamon Press, London, 1966.
- [159] F. Castang. *Synthèse Robuste de Filtres de Diagnostic Pour la Surveillance À Base de Modèle Des Systèmes Multivariables et Incertains*. PhD thesis, Université Bordeaux 1, France, 2003.
- [160] C. Join, M. Fliess, and H. Sira-Ramirez. Fault diagnosis of closed loop linear systems with parametric uncertainties. Carcassonne, France, 2004. 15th International Workshop on Principles of Diagnosis.
- [161] M. Eslami. *Theory of Sensitivity in Dynamic Systems: An Introduction*. Springer Verlag, Berlin, 1994.
- [162] E. Rosenwasser and R. Yusupov. *Sensitivity of Automatic Control Systems*. CRC Press, Florida, 2000.
- [163] B. Giovannini. Etude bibliographique relative au développement de réactions chimiques non contrôlées dans l'industrie. Technical report, Institut National de l'environnement Industriel et des Risques (INERIS), 2000.
- [164] J.T. Chereng and G. Stephanopoulos. Representation of process trends part i. a formal representation framework. *Computers Chemical Engineering*, 14 (4-5):495–510, 1990.
- [165] L. T. Westerberg and B. R. Benjamin. Thoughts on a future equation-oriented flow-sheeting system. *Computers and chemical Engineering*, 9:517–526, 1985.
- [166] L. T. Briegler. Chemical process simulation. *Chemical Engineering*, pages 50–61, 1989.
- [167] C. Wollhaf, K. Schultz, and S. Engell. BaSiP-batch process simulation with dynamically reconfigured process dynamics. *Computer and Chemical Engineering supplement*, pages 1281–1286, 1996.
- [168] A. Moyse, L. Jourda, J. M. Le-Lann, and X. Joulia. Process, hydraulic and control devices in odysseo, an object-oriented framework for process dynamic simulation. pages 5–7, Montpellier, 1999. Montpellier.
- [169] A. Mukherjee and A. K. Samantaray. System modelling through bond graph objects on SYMBOLS 2000. In *Proc. ICBGM'01, Simulation Series*, pages 164–170, 2001.
- [170] M. Blanke and T. Lorentzen. Sa tool-a software tool for structural analysis of complex automation systems. In *IFAC Safeprocess Conference*, Beijong, china, 2001.
- [171] B. Celse, S. Carvin, B. Herm, S. Gentil, and L. Travé-Massages. Model based diagnosis

-
- module for a FCC pilot plant. *Oil and Gas science and technology Revue IFP*, 60(4):661–679, 2000.
- [172] J. M. Koscielny, M. Syfert, and P. Wnuk. Advanced monitoring and diagnostic system "AMandD". Proceeding of the 2006 IFAC World Congress, 2006.
- [173] C. Feliot. *Modélisation de Systèmes Complexes : Intégration et Formalisation de Modèles*. PhD thesis, Université des Sciences et Technologies de Lille1, Villeneuve D'Ascq (France), 1997.
- [174] A. Mukherjee and A. K. Samantaray. System modelling through bond graph objects on SYMBOLS 2000. *International Conference on Bond Graph Modelling and Simulation (ICBGM'01)*, 33:164–170, 2001.
- [175] Département Génie Des Procédés. TP opérations unitaires unités pilotes, réacteur polyvalent 10 litres: Règle et formalisme. Technical report, 2008.
- [176] M. R. Spiegel. *Statistique*. The McGraw-Hill Companies, Inc. ISBN. 2-10-0006515-7., 2002.

RESUME

Le travail de thèse proposé concerne la conception intégrée des algorithmes de surveillance des processus chimiques à base de modèles bond graph couplés. Cette recherche est réalisée dans le cadre de la thématique «Bond graphs pour la supervision des procédés énergétiques» développée entre l'Université de Gabès (Tunisie) et l'Ecole Polytechnique Universitaire de Lille (France).

L'outil bond graph par son caractère unifié et multidisciplinaire, utilisé pour la surveillance et le diagnostic du processus chimique, incorpore la cinétique chimique des différents phénomènes d'une réaction équilibrée (de la chaleur et de transport de masse). La stratégie de diagnostic à base de modèle Bond graph est adaptée pour détecter et localiser les défauts cinétiques et thermodynamiques dus à l'apparition des événements secondaires dans un réacteur chimique.

En outre, les propriétés causales et structurales du modèle bond graph sont utilisés non seulement pour la simulation de dynamique de système mais également pour la conception des algorithmes de détection et d'isolement de défaut (FDI) (c-à-d la génération des indicateurs de défaut formels) pour la surveillance en ligne des défauts capteurs, actionneurs et des phénomènes physico-chimiques et déterminer ainsi les conditions de surveillabilité structurelle des équipements pertinents sans calcul numérique. Le modèle Bond Graph à paramètre incertain sous forme des transformations linéaires fractionnaires (BG-LFT) développé, capable d'être exploité pour développer des générateurs dynamiques de seuil et achever la robustesse par rapport aux incertitudes de modèle en combinaison avec la sensibilité aux défauts.

Mots clés : *Bond Graph Couplé, Analyse Structurelle, Redondance Analytique, Modèle BG-LFT Incertain, Réacteur Chimique, Défaillance Physique.*

ABSTRACT

This thesis treats the problems relative to the integrated design of the monitoring algorithms for chemical processes based on coupled Bond Graph models. This research is carried out within the framework of the set of themes «Bond graph tool for the supervision of the energy processes» developed between the University of Gabès (Tunisia) and the University Polytechnic school of Lille (France).

The bond graph model as unified and multidisciplinary tool, used for supervision and diagnosis of chemical process, incorporates the chemical kinetics of an equilibrated reaction, heat and mass transport phenomena. A bond graph model based diagnostic strategy, is adopted to detect and isolate kinetic and thermodynamic drift of chemical reactors due to appearance of secondary reactions. Furthermore, the causal and structural properties of the bond graph model are used not only for system dynamics simulation but also to design Fault Detection and Isolation (FDI) algorithms (i.e. the generation of formal fault indicators) for online supervision of faults affecting sensors, actuators, physico-chemical components and phenomena and determine the conditions of structural surveillability of the relevant equipment without numerical calculation. The methodology using a Bond Graph representation in linear fractional transformation (LFT) form is shown to be a valuable tool for developing dynamic threshold generators and achieving robustness against model uncertainty in combination with sensitivity to faults.

Key words: *Coupled Bond Graph, Structural Analysis, Analytical Redundancy, Uncertain BG-LFT Model, Chemical Reactor, Physical Failure.*