

**This document must be cited according to its final version
which is the Master of Science thesis:**

**Weijun ZHOU³,
«Commande d'un procédé
de déshydrogénisation de propane par catalyse»,
rapport de stage de fin d'études de
Master STS mention Génie Electrique Génie des Procédés¹,
parcours recherche Génie des Systèmes Automatisés²,
UCBL1, 2010-2011
Advisors :
Pascal Dufour³ and Zhou⁴**

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

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

1

<http://mastergegp.univ-lyon1.fr>

2

<http://m2rgsa.univ-lyon1.fr/>

3

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

4

ECUST Shanghai, China



Commande d'un procédé de déshydrogénisation de propane par catalyse

Etudiant :
ZHOU Weijun
Master GEGP-M2R
GSA 2010-2011

Encadrants :
DUFOUR Pascal
HAMMOURI Hassan
ZHOU Xingui





Sommaire

- 1.Introduction
- 2.Modèle
- 3.Simulation numérique du modèle
- 4.Conclusions et perspectives

Introduction



➤ Nouveau projet :

- Entre l'équipe SNLEP de LAGEP et ECUST(CHINE)
- Système : dehydrogenation + regeneration jamais étudié en commande
- But au LAGEP : synthèse du modèle et commande optimale

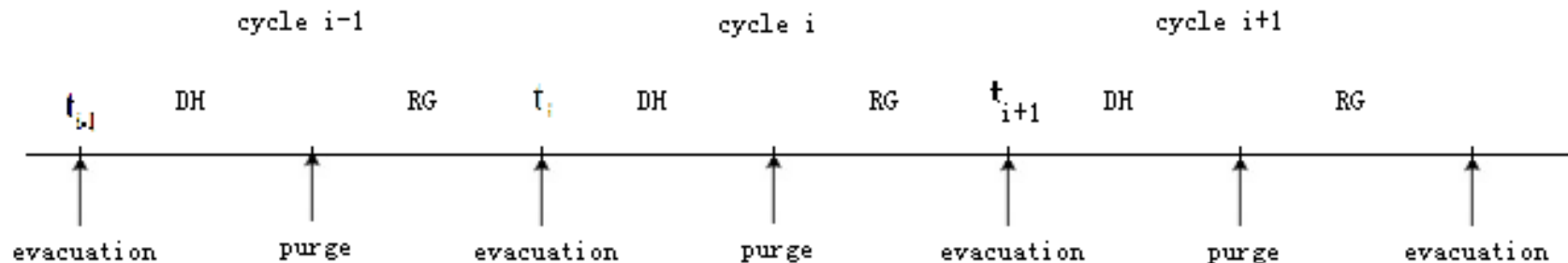
➤ Mon stage :

- Problème : documents difficiles à comprendre (rapport non publié et programme) pour le modèle
- Travail effectué : synthèse et mise en forme du modèle en système EDP utilisable par automaticien
- Travail en cours : simulation numérique en boucle ouverte du modèle de déhydrogenation

Modèle

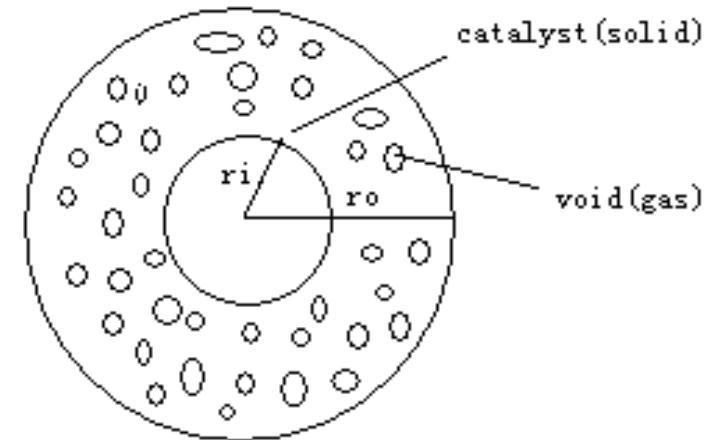
Répétition de 4 modes en séquences :

- Déhydrogenation du propane (DH)
- Purification
- Regeneration du catalyseur (RG)
- Evacuation



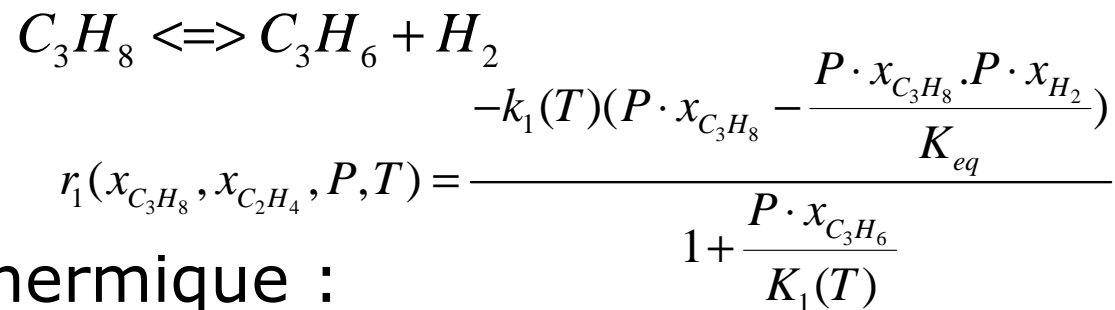
Modèle

- Système hétérogène
- Réacteur tubulaire

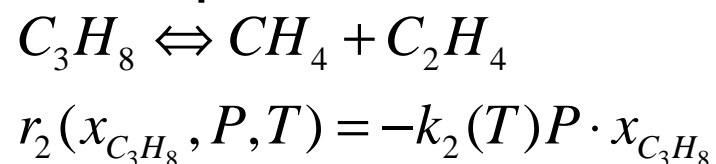


Réactions pendant la déhydrogenation

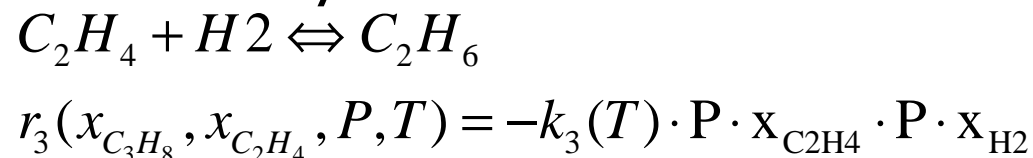
- Déhydrogenation :



- Craquage thermique :



- Hydrogénation d' éthylène:



Taux de cokéfaction et activité du catalyseur

➤ Taux de cokéfaction :

$$\begin{cases} \frac{\partial C_M}{\partial t} = k_{2C}(T) \\ \frac{\partial C_m}{\partial t} = \frac{C_m k_{2C}^2(T) RT^2}{C_M RT^2 (k_{2C}(T) + C_{\max} C_M k_{1C}(T))} \\ k_{ic}(T) = k_{0ic} \exp\left(\frac{-E_{aic}}{R} \left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T_m}\right)\right) \end{cases}$$

➤ Activité du catalyseur :

$$\begin{cases} a(C_M, C_m, T) = (1 - \alpha_1(T) C_m) + \alpha_2 C_m e^{-\alpha_3 \frac{C_M}{C_m}} \\ \alpha_1(T) = r_{01} e^{\frac{-E_{ar1}}{R} \left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T_m}\right)} \end{cases}$$

Synthèse du modèle de DH

$$\begin{cases} \frac{\partial x}{\partial t} = f_{DH.D} \left(\frac{\partial x}{\partial r}, x, u \right) \\ f_{DH.B} \left(\frac{\partial x}{\partial r}, x, u \right) = 0 \end{cases}$$

➤ États avec dynamiques

CM, Cm

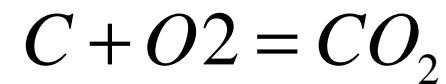
➤ États sans dynamique

nt, P, T, xAr, xCH4, xC2H4, xC2H6, xC3H6, xC3H8,
xH2

Régénération

La combustion du coke

- réaction chimique



- processus de transport

la diffusion des réactifs

diffusion des pores

diffusion externe

Synthèse du modèle de RG

$$\begin{cases} \frac{\partial x}{\partial t} = f_{RG.D} \left(\frac{\partial x}{\partial r}, x, u \right) \\ f_{RG.B} \left(\frac{\partial x}{\partial r}, x, u \right) = 0 \end{cases}$$

- États avec dynamiques:
CM, Cm, T, xO2
- États sans dynamique
P, Pas, Tas

Connection entre modèles DH et RG

- Entre l'état final de l'un et l'état initial de l'autre
- Coke multicouche et coke monocouche
- Température
- Pression
- Fraction molaire initiale de chaque gaz pour chaque modèle

Simulation numérique du modèle DH

- Complexité du système
- Système de dimension infinie
- 12 variable d'états pour la déhydrogenation
- Système non linéaire

Simulation numérique du modèle DH

○ Exemple :

$$\frac{\partial x_{CH_4}}{\partial r} = \frac{A(r) \cdot \rho_B}{n_T} \cdot [-x_{CH_4} \cdot a(C_M, C_m, T) \cdot r_1(P, T, x_{C_3H_6}, x_{C_3H_8}, x_{H_2}) + (1 - x_{CH_4}) \cdot r_2(P, T, x_{C_2H_8}) - x_{CH_4} \cdot r_3(P, T, x_{CH_4}, x_{C_2H_6}, x_{C_3H_6})]$$

où :

$$\begin{cases} a(C_M, C_m, T) = (1 - \alpha_1(T)C_m) + \alpha_2 C_m e^{-\alpha_3 \frac{C_M}{C_m}} \\ \alpha_1(T) = r_{01} e^{\frac{-E_{ar1}}{R} \left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T_m} \right)} \end{cases}$$

Méthode des différences finies

- Outil numérique basé sur l'équation locale qui est discretisée et résolue de proche en proche .
- Le domaine spatial est divisé en un nombre n_i d'intervalles
- Développements de Taylor

$$y(z_i + \Delta z, t) = y_{i+1}(t) = y_i(t) + \Delta z \left. \frac{\partial y(t)}{\partial z} \right|_{z=z_i} + \frac{\Delta z^2}{2} \left. \frac{\partial^2 y(t)}{\partial z^2} \right|_{z=z_i} + O(\Delta z^3)$$

$$y(z_i - \Delta z, t) = y_{i-1}(t) = y_i(t) - \Delta z \left. \frac{\partial y(t)}{\partial z} \right|_{z=z_i} + \frac{\Delta z^2}{2} \left. \frac{\partial^2 y(t)}{\partial z^2} \right|_{z=z_i} + O(\Delta z^3)$$

$$\left. \frac{\partial y(t)}{\partial z} \right|_{z=z_i} = \frac{y_{i+1}(t) - y_i(t)}{\Delta z} + O(\Delta z)$$



Méthode des différences finies

- Avec l'approximation par différences finies à gauche, le modèle devient un système algébro-différentiel

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial x_{dyn_i}}{\partial t} = f_{DH.dyn}(x_{dyn_i}, x_{stat_i}, u_i) \\ \frac{x_{stat_i,j} - x_{stat_i,j-1}}{\Delta r} = f_{DH.stat.diff}(x_{dyn_i}, x_{stat_i}, r, u_i) \\ x_{stat_i} = f_{DH.stat.al}(x_{dyn_i}, x_{stat_i}, u_i) \end{array} \right.$$

Simulation numérique du modèle DH

○ Organisation des fichiers matlab

- Lancement : main
- 17 fonctions 'compute_dh_function.m'
- 'split_x_dyn_k_x_stat_k.m' et merge_x_dyn_k_x_stat_k.m
- initialize_offline_all_constants.m(m.)
etc...

○ 31 fichiers matlab et 1774 lignes de codes

Calcul du système avec ode15s

- Le système algébro-différentiel peut être résolu par ode 15s.

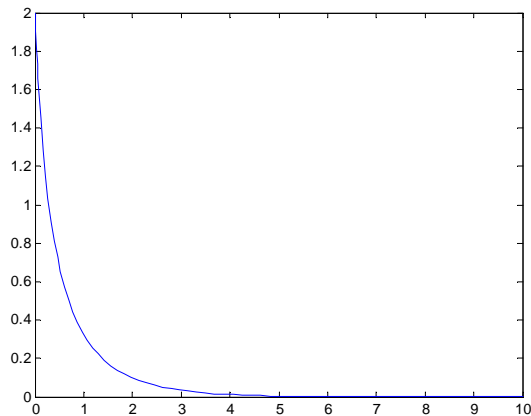
$$y' = f(t, y) \quad M(t, y)y' = f(t, y)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial x_{dyn_i}}{\partial t} = f_{DH.dyn}(x_{dyn_i}, x_{stat_i}, u_i) \\ 0 = \frac{x_{stat_i j} - x_{stat_i j-1}}{\Delta r} - f_{DH.stat.diff}(x_{dyn_i}, x_{stat_i}, r, u_i) \\ 0 = x_{stat_i} - f_{DH.stat.al}(x_{dyn_i}, x_{stat_i}, u_i) \end{array} \right.$$

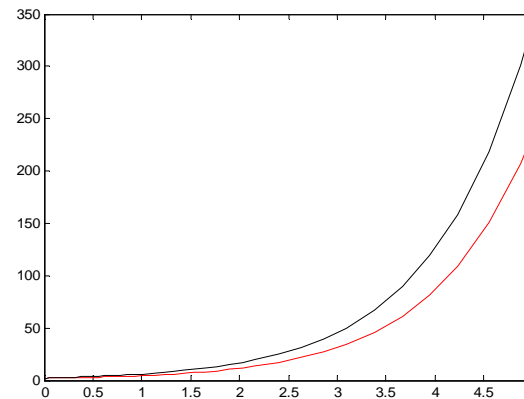
- Pas de dynamique

Vérification de ode15s

$$\begin{cases} y_1' = -y_1 + y_2 \\ y_1^2 + y_2 = 0 \end{cases}$$



$$\begin{cases} \frac{\partial x_1}{\partial t} = x_1 + x_2 \\ \frac{\partial x_2}{\partial r} = x_1 x_2 \end{cases}$$



Options de ode15s

- RelTol : $\frac{\Delta x}{x} = 0.1\%$

- AbsTol :

Tolérance par défaut trop grande pour l'intégration

m.AbsTol=[10⁻¹² 10⁻¹² 10⁻³ 10⁻¹ 10⁻¹ 10⁻⁴ 10⁻⁴ 10⁻⁴ 10⁻⁴ 10⁻⁴ 10⁻⁴ 10⁻⁴]'

Options de ode15s

- Mass Singular
 - 'Need a better guess y_0 for consistent initial conditions'
- Chercher une condition initiale consistante
 - fsolve
 - saut du valeur dans la matrice
 - valeur négative
 - Lsqnonlinear
 - erreur numérique xTol

Conclusions

- Modèle sous forme EDP utilisable par automaticien
- Simulation numérique du modèle du déhydrogenation : en cours

Perspectives

Problèmes à résoudre avec ECUST

- Equations : valables pour n'importe quelle commande ?
- Valeurs numériques et/ou unités ?

Matlab : intégration