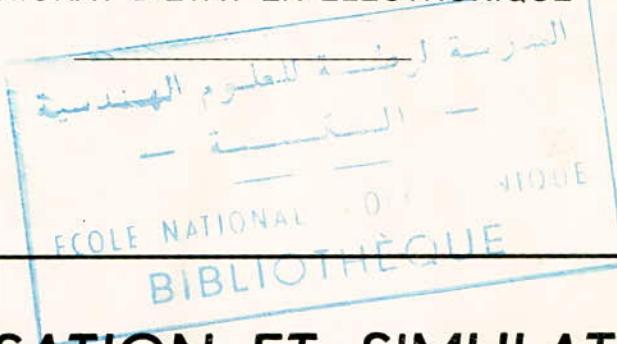


UNIVERSITE DES SCIENCES ET DE LA TECHNOLOGIE
HOUARI BOUMEDIENE
— ALGER —

ECOLE NATIONALE POLYTECHNIQUE
DEPARTEMENT ELECTRONIQUE ET ELECTROTECHNIQUE

PROJET DE FIN D'ETUDES

INGENIORAT D'ESTAT EN ELECTRONIQUE



MODELISATION ET SIMULATION DU FONCTIONNEMENT D'UNE COLONNE DE DISTILLATION

Proposé par :

Mr J.P. GAUTHIER

Docteur - Ingénieur

Etudié par :

M.O. AHNIA



UNIVERSITE DES SCIENCES ET DE LA TECHNOLOGIE
HOUARI BOUMEDIENE
— ALGER —

ECOLE NATIONALE POLYTECHNIQUE
DEPARTEMENT ELECTRONIQUE ET ELECTROTECHNIQUE

PROJET DE FIN D'ETUDES

INGENIORAT D'ETAT EN ELECTRONIQUE

الجامعة الوطنية للعلوم والتكنولوجie
Ecole Nationale Polytechnique
DÉPARTEMENT ELECTRONIQUE ET ELECTROTECHNIQUE

MODELISATION ET SIMULATION DU FONCTIONNEMENT D'UNE COLONNE DE DISTILLATION

Proposé par :

Mr J.P. GAUTHIER

Docteur - Ingénieur

Etudié par :

M.O. AHNIA

- D E D I C A C E S -

- A la mémoire de mes grands parents .
- A mes parents .
- A ma femme et à ma fille .
- A mes frères et soeurs .
- A tous ceux qui me sont proches de sang ou de cœur .

=====

=====

=====

====

==

- REMERCIEMENTS -

Je tiens à exprimer mes plus vifs remerciements à :

- Monsieur J.P. GAUTHIER, mon promoteur, Docteur - Ingénieur, Maître-Assistant à l'E.N.P.A., pour m'avoir guidé et prodigué de précieux conseils tout au long de l'élaboration de ce travail.
 - Monsieur H. KESSIS, Ingénieur au " C.S.T.N. ", pour m'avoir aidé et facilité le passage de mes programmes à l'ordinateur.
 - Monsieur M. MAZARI, Secrétaire au Département de Chimie à l'Université d'Alger, pour avoir effectué avec soin tous mes travaux de dactylographie.

Que tous ceux qui ont contribué de près ou de loin à la réalisation de ce projet et à ma formation, trouvent ici l'expression de ma sincère gratitude.

- MODELISATION ET SIMULATION
DU FONCTIONNEMENT
D'UNE COLONNE DE
DISTILLATION -

- SOMMAIRE -

	Pages
<u>Introduction:</u>	Int.... 1
<u>PREMIERE PARTIE: GENERALITES</u>	
I. <u>GENERALITES SUR LES COLONNES DE DISTILLATION:</u>	1
I.1. Distillation:.....	1
II.2. Colonne:.....	4
II.3. Plateaux:.....	4
<u>DEUXIEME PARTIE: MODELISATION</u>	
II. <u>MODELISATION DES COLONNES DE DISTILLATION:</u>	10
II.1. Hypothèses:.....	10
II.2. Equilibres liquide-vapeur:.....	10
II.3. Bilans matériels et thermiques:.....	11
II.3.1. Bilans matériels:.....	11
II.3.2. Bilan thermique global:.....	11
II.4. Résolution du modèle dynamique de colonne à distiller:....	12
II.4.1. <u>Première étape:</u>	
- calcul des équilibres liquide-vapeur et des enthalpies liquide-vapeur:.....	13
II.4.2. <u>Deuxième étape:</u>	
- calcul des débits liquides et vapeurs, L_j et V_j sur chaque plateau:.....	21
II.4.3. <u>Troisième étape:</u>	
- calcul des concentrations liquides à l'instant $T + \Delta T$:.....	27

TROISIEME PARTIE: SIMULATION

III. SIMULATION DYNAMIQUE	31
III.1. Algorithme de résolution du modèle dynamique:.....	31
III.2. Notations utilisées dans les programmes écrits:.....	33
III.3. Organigramme principal de déroulement des étapes de calcul:.....	34
III.4. Organigramme de calcul des équilibres liquide-vapeur (CAEQLV):.....	35
III.5. Organigramme de calcul des débits liquides et vapeurs: (BIMATG):.....	36
III.6. Organigramme de remplissage de la matrice $A_{i,j}$ et du vecteur B_j: (REMPA):.....	38
III.7. Organigramme de résolution du système $AX=B$ donnant les concentrations à l'instant $(T+\Delta T)$: (RESOLX):.....	40
III.8. Organigramme de contrôle de l'état d'équilibre:(CØNTRØ)...	43
III.9. Ecriture du programme principal:.....	44
III.10. Ecriture du S/programme: CAEQLV:.....	47
III.11. Ecriture du S/programme: BIMATG:.....	48
III.12. Ecriture du S/programme: REMPLA:.....	49
III.13. Ecriture du S/programme: RESØLX:.....	50
III.14. Ecriture du S/programme: CØNTRØ:.....	51
- DONNEES POUR ORDINATEUR:	52
- PRESENTATION DES RESULTATS:.....	53
- INTERPRETATION DES RESULTATS:.....	61
- CONCLUSION:.....	63

- INTRODUCTION -

Tout système physique est caractérisé par un ensemble de grandeurs (entrées et sorties).

Ici on appelle sorties, les grandeurs caractéristiques ou variables auxquelles on s'intéresse directement et que l'on mesure.

Pour les entrées, on pourra négliger celles dont l'effet quantitatif sur le système est très faible.

Pour être maître de certaines de ces entrées une réalisation de la commande du système est nécessaire. Par exemple, faire varier les entrées pour que les sorties aient des valeurs fixées à l'avance.

Avant de concevoir une commande on a besoin de passer par l'intermédiaire de modèles pour représenter le fonctionnement du système, en particulier pour pouvoir prédire les valeurs des sorties connaissant celles des entrées.

D'où le but de notre étude ici est de modéliser un système physique qui est une colonne de distillation, puis simuler son fonctionnement. Cela va nous permettre de bien connaître le fonctionnement de la colonne que ce soit en régime statique qu'en régime dynamique et de repérer les grandeurs d'entrées dont leur influence sur les sorties est importante.

PREMIERE PARTIE

- GENERALITES -

I - GENERALITES SUR LES COLONNES DE DISTILLATION:

I.1. - Distillation

La distillation est un processus de séparation des mélanges liquides ou des solutions en leurs composants différents les uns des autres par leurs températures d'ébullition. Travaillant comme une machine thermique entre une source chaude (Four ou rebouilleur) et une source froide (condenseur de tête), la distillation met en oeuvre un contre-courant de liquide et de vapeur, discontinu dans le cas des colonnes à plateaux.

Comme la thermodynamique l'a montré, le contact des deux phases conduit à un échange de constituants; les plus volatils s'accumulent dans la vapeur et sont éliminés au sommet de la colonne par le condenseur, on obtient ainsi un distillat, et les éléments lourds passent en phase liquide et sont soutirés au fond de la colonne.

Cette répartition des constituants entre les deux phases se traduit entre la tête et le fond de la colonne par un gradient de température qui dérive directement du gradient de concentration.

En recommençant plusieurs fois à évaporer le liquide et à condenser au sommet de la colonne les vapeurs formées on peut séparer entièrement le mélange initial en ses divers composants (voir schéma unité de distillation fig. 1).

De ce qui précède il ressort que l'étude de la distillation proprement dite devra être précédée par l'analyse du phénomène diffusionnel fondamental, appelé "équilibre liquide vapeur".

L'échange réciproque de constituants d'une phase vers l'autre par diffusion conduit à un équilibre théorique.

Un tel système en équilibre est caractérisé par des relations entre les concentrations des constituants dans chaque phase.

En outre, si l'on considère l'évolution du mélange entre un état initial quelconque et celui d'équilibre, des équations de bilan matières et une équation de bilan thermique complèteront la description du système.

Cela se fait à l'aide de deux principes fondamentaux régissant les processus physiques et chimiques.

Il s'agit :

- du principe de conservation de la matière
- du premier principe de la thermodynamique ou principe de conservation de l'énergie.

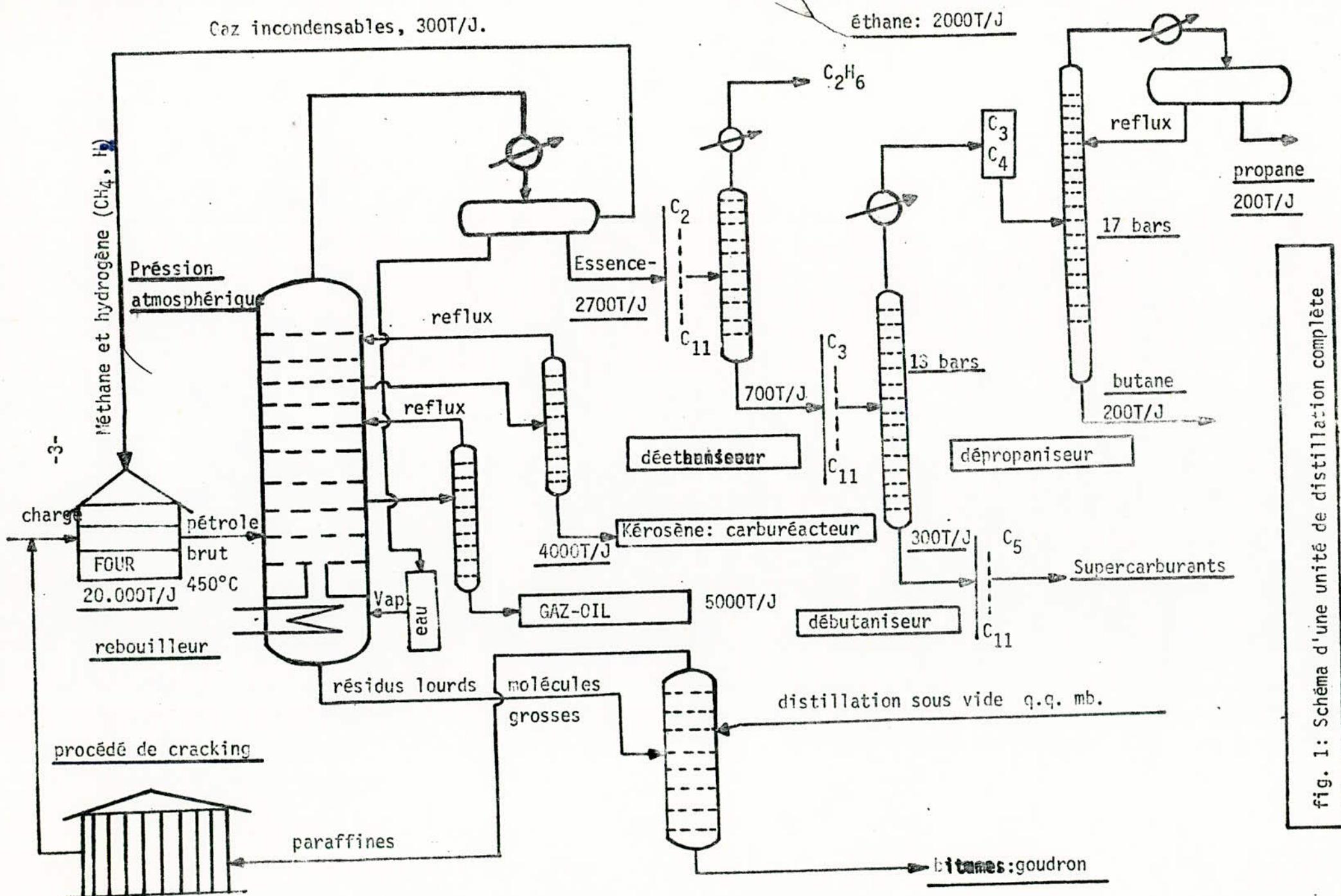


fig. 1: Schéma d'une unité de distillation complète

II.2. Colonne:

Une colonne est une sorte de tour composée à sa base d'un rebouilleur et à sa tête d'un condenseur, et entre ces deux extrémités il y a un ensemble de plateaux tels que dans la phase liquide de chacun soient injectées les vapeurs du plateau se trouvant en dessous, et le résidu liquide de celui se trouvant au-dessus.

II.3. Plateaux

Les plateaux sont constitués par des plaques perforées (fig. 2) équipées de tubes raccords et de cloches qui les protègent. Les vapeurs remontent vers la partie supérieure de la colonne, par les raccords et les fontes ménagées dans les cloches.

Le niveau constant du liquide (du reflux) est maintenu dans les plateaux à l'aide de cloisons spéciales. Le reflux excédentaire s'écoule par les raccords d'un plateau sur l'autre.

Pour obtenir le fonctionnement normal d'une colonne, il est nécessaire :

- a) - d'assurer un contact le plus étroit entre le reflux et le flux ascendant des vapeurs.
- b) - de maintenir le régime de température approprié.

La première condition est assurée par la conception même des cloches et des plateaux, et la seconde par le choix de la quantité convenable de reflux.

On se sert comme reflux d'une partie du produit final de la colonne, qui retourne constamment (fig. 3).

Le flux ascendant des vapeurs est maintenu par la vaporisation partielle de la phase liquide en bas de la colonne, assurée par un rebouilleur ou de la vapeur d'eau.

Dans une colonne, il est indispensable que les liquides s'écoulant du plateau supérieur ne soient pas en équilibre et n'aient pas une température identique à celle des vapeurs remontant du plateau inférieur.

C'est seulement dans ce cas qu'à la suite de contact entre de telles vapeurs et le liquide, les vapeurs sont partiellement refroidies, se condensent et s'enrichissent de composants à basse température d'ébullition; tandis que le liquide est partiellement réchauffé, vaporisé et enrichi de composants à haute température d'ébullition.

Seules les vapeurs qui montent d'un plateau et le liquide qui s'écoule du même plateau dans une colonne peuvent être en état d'équilibre et avoir donc des températures identiques.

Remarque:

Un plateau de la colonne dans lequel, à la suite de contact entre la vapeur et le liquide, il s'établit un équilibre, est appelé plateau théorique ou idéal.

On n'arrive pas en général à obtenir l'état équilibré de vapeur et de liquide dans des plateaux réels.

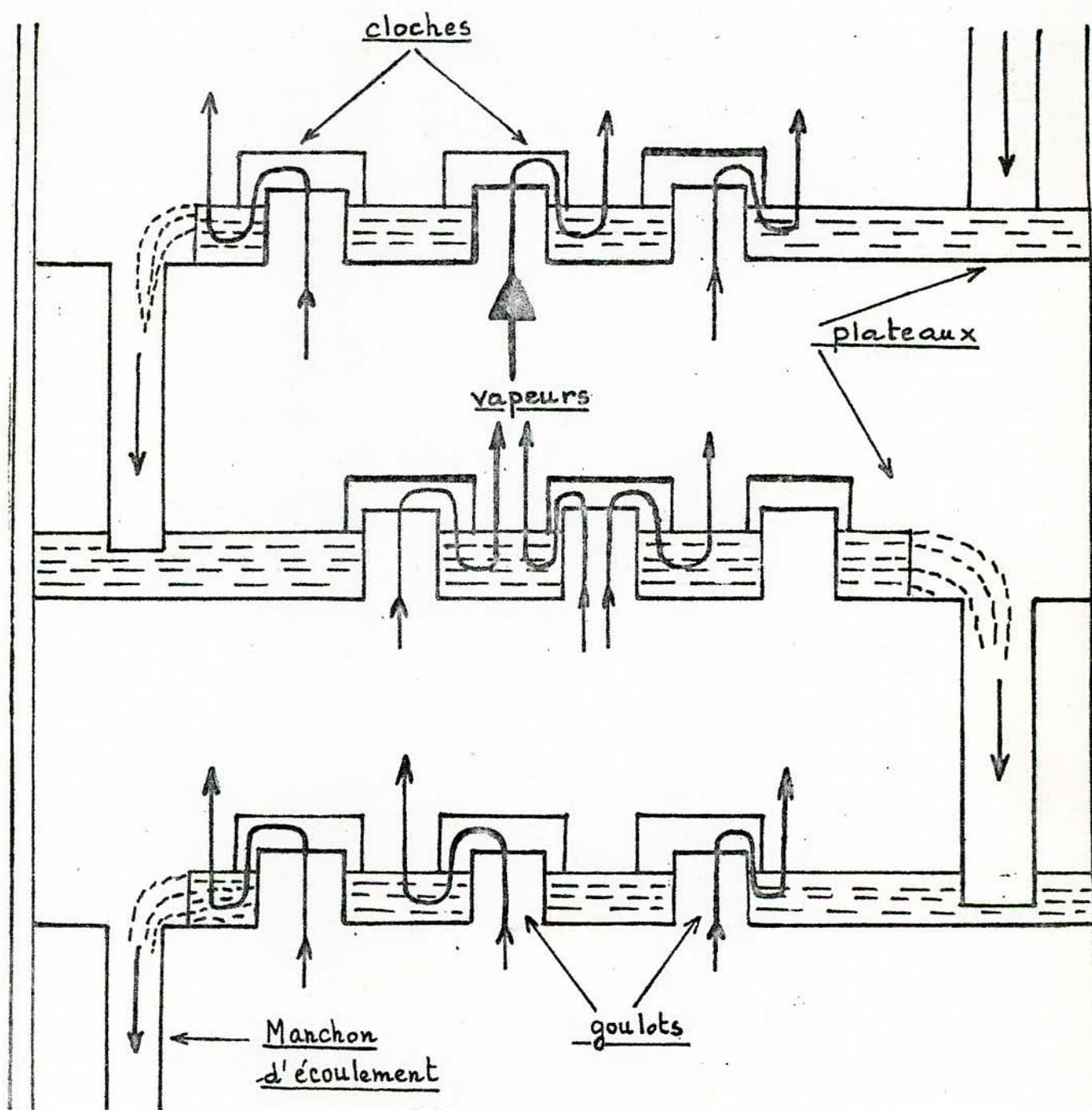


Fig. 2: Plateaux d'une colonne

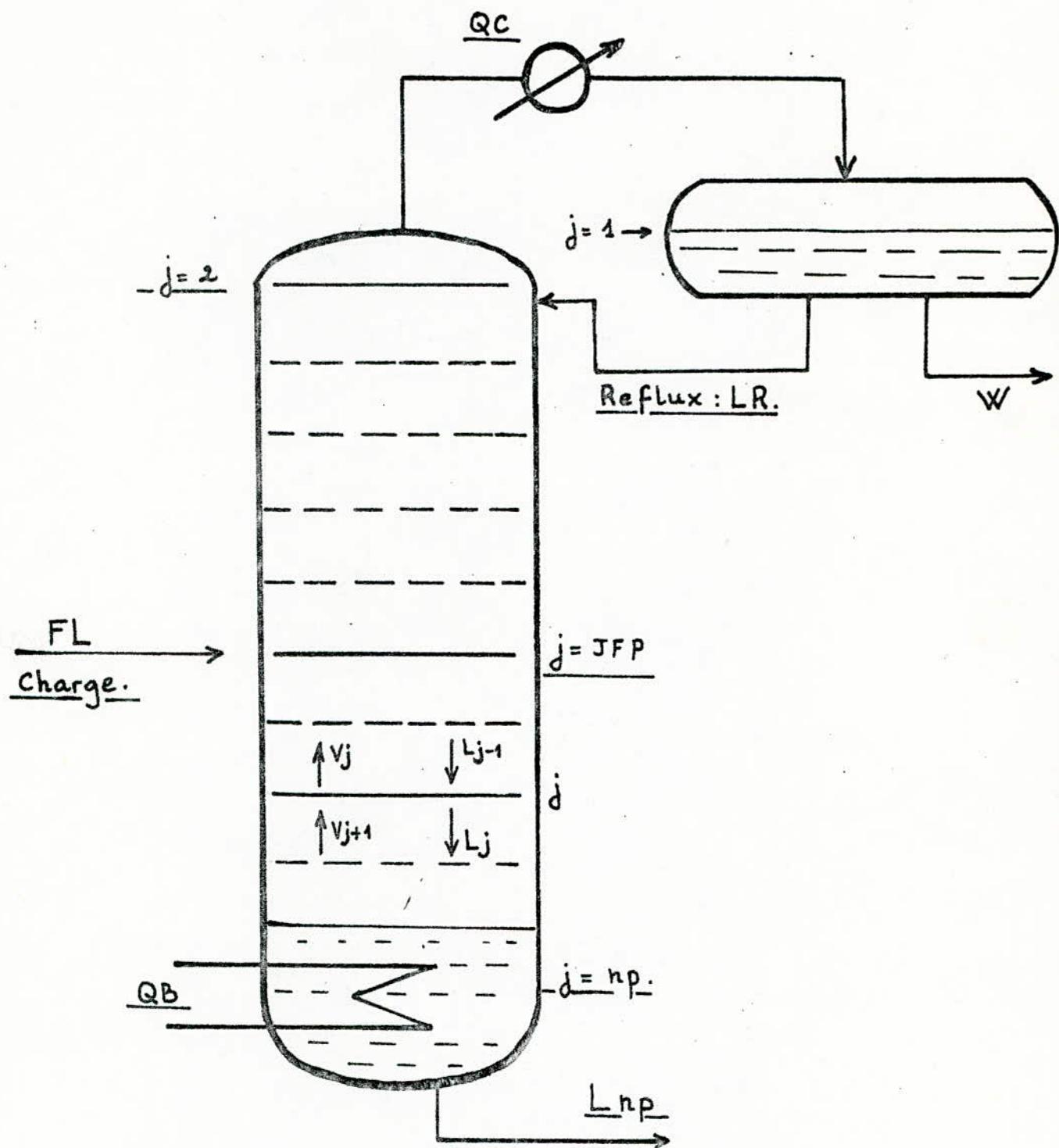


Fig 3. Colonne générale

DEUXIEME PARTIE
- MODELISATION -

LES NOTATIONS UTILISEES SONT LES SUIVANTES:

i : n° de composant

j : n° de plateau

n_c : nombre de composants

n_p : nombre de plateaux

JFP : plateau d'alimentation

x_{ij} : concentration liquide de constituant i sur le plateau j

y_{ij} : concentration vapeur du constituant i sur le plateau j

L_j : débit liquide du plateau j

v_j : débit vapeur du plateau j

U_j : accumulation molaire liquide sur le plateau j

HL_j : enthalpie liquide du mélange sur le plateau j

HV_j : enthalpie vapeur du mélange sur le plateau j

K_{ij} : coefficient d'équilibre: $K_{ij} = y_{ij}/x_{ij}$

T_j : température sur le plateau j

FL : débit liquide d'alimentation

Z_i : concentration d'alimentation (en composant i)

HF : enthalpie d'alimentation

W : distillat liquide

Q_c : puissance thermique du condenseur

Q_B : puissance thermique du rebouilleur

II - MODELISATION DES COLONNES DE DISTILLATION:

But: C'est de réaliser un ensemble de programmes permettant de produire des modèles de simulation (modèles mathématiques) pour tous les cas possibles ayant trait à la distillation.

III.1. Hypothèses

Les hypothèses physiques faites pour cette étude sont les suivantes:

- Idéalité des plateaux, les deux phases liquide et vapeur sont en équilibre à chaque instant.
- Le mélange est parfait dans chaque plateau.
- Les retenues de la phase vapeur sont négligeables.
- Etablissement immédiat des débits (dynamique de la partie hydraulique négligeable devant la dynamique d'évolution des équilibres liquide-vapeur).
- Dynamique négligeable des transferts de chaleur dans le cas de phénomènes du type échanges thermiques avec l'extérieur.
- Pertes de chaleur nulles.
- Retenues molaires liquides constantes sur les plateaux.

II.2. Equilibres liquide-vapeur

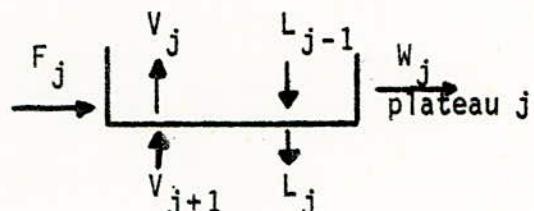
Nous nous intéressons ici à l'état d'équilibre liquide-vapeur d'un mélange de n_c constituants

le coefficient d'équilibre du constituant dans le mélange est défini par la relation $K_i = \frac{y_i}{x_i}$ (1)

II.3. Bilans matériels et thermiques

II.3.1. Bilans matériels

On applique le principe de la conservation de la matière,



Au plateau j on a:

$$(F_j + V_{j+1} + L_{j-1}) - (V_j + L_j + W_j) = 0, \quad j = 1, \dots, n_p \quad (2)$$

$$\sum_{i=1}^{n_c} X_{ij} = 1, \quad j = 1, \dots, n_p \quad (3)$$

Sur le plateau j, pour le constituant i on a:

Cas d'un modèle statique:

$$(F_j Z_{ij} + V_{j+1} Y_{i,j+1} + L_{j-1} X_{i,j-1}) - (V_j Y_{ij} + L_j X_{ij} + W_j X_{ij}) = 0 \quad (4)$$

Cas d'un modèle dynamique:

$$\begin{aligned} & T+\Delta T & T+\Delta T & T+\Delta T & T+\Delta T \\ & \Delta T(F_j Z_{ij} + L_{j-1} X_{i,j-1} + V_{j+1} K_{i,j+1} X_{i,j+1} - V_j K_{i,j} X_{ij} - W_j X_{ij}) \\ & - L_j X_{ij}) = U_j (X_{i,j} - X_{i,j}) \end{aligned}$$

II.3.2. Bilan thermique global :

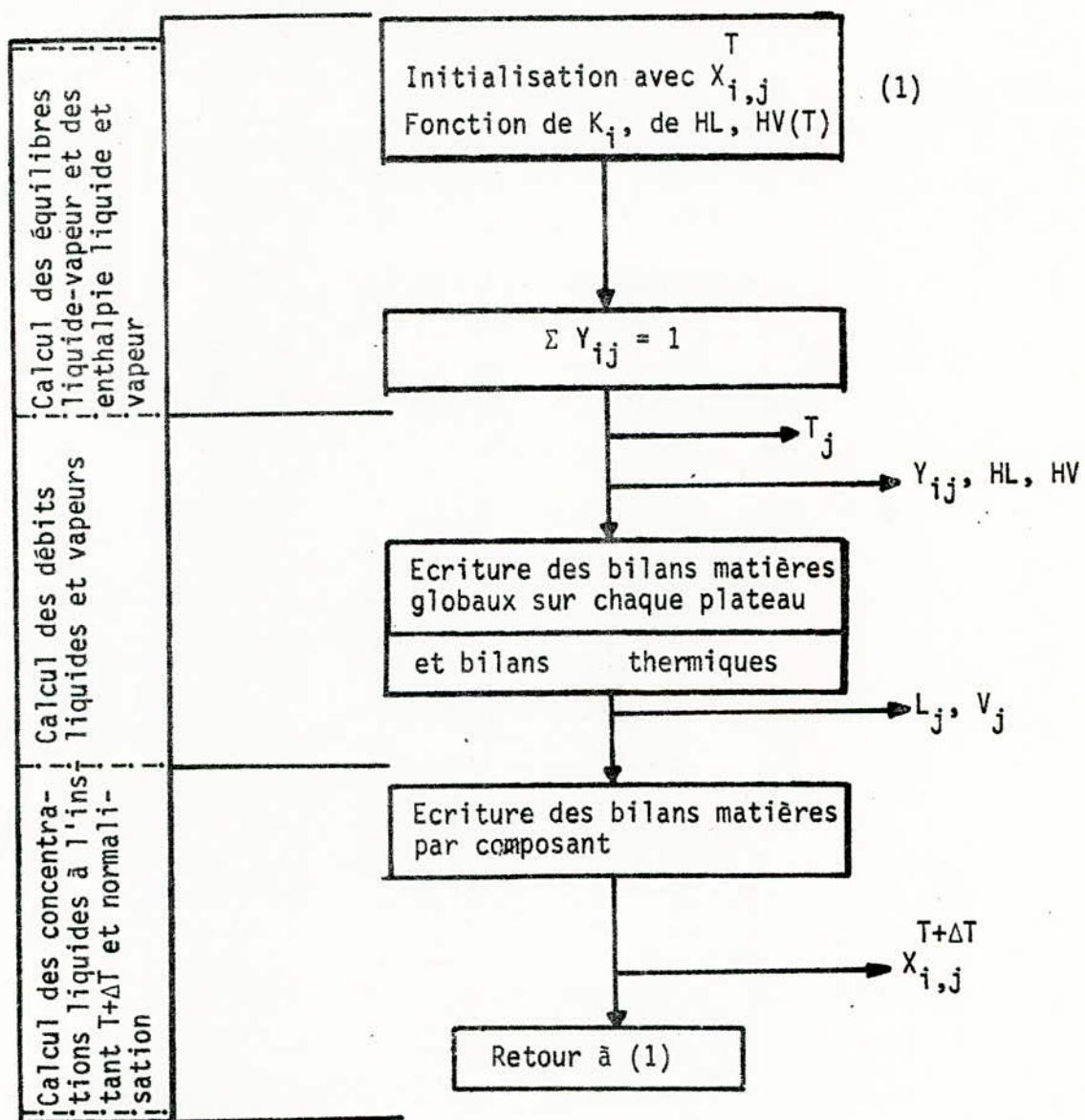
On applique le principe de conservation de l'énergie, on a :

$$(F_j H_F + V_{j+1} \cdot H_V_{j+1} + L_{j-1} H_L_{j-1} + Q_j) - (V_j H_V_j + L_j H_L_j + W_j H_L_j) = 0 \quad (5)$$

II.4. Résolution du modèle dynamique de colonne à distiller

Nous ferons ici l'hypothèse supplémentaire que le profil de pression dans la colonne est constant dans le temps; cela compte tenu des régulations de pression qui existent en général sur les colonnes.

La marche des étapes est comme suit :



II.4.1. Première Etape

- Calcul des équilibres liquide-vapeur et des enthalpies liquide-vapeur

Cherchons tout d'abord comment évoluent les coefficients d'équilibre $K_i = \frac{Y_i}{X_i}$ des deux composants du mélange (dans le cas d'un mélange binaire) en fonction de la température, ainsi que les enthalpies liquide et vapeur du mélange en fonction de la température.

Pour cela nous avons pris dans la littérature un tableau de mesures d'évolution d'une colonne binaire pour une pression constante de 17,5 bars et pour de différentes températures allant de 55° à 105° (Tableau 1) à savoir les débits liquides et vapeurs, les enthalpies liquide et vapeur, les concentrations liquides et vapeurs et les coefficients d'équilibre déduits. Le nombre de mesures est 18 (18 plateaux).

A partir de cela et en se servant des équations suivantes:

$$K_1 = \frac{Y_1}{X_1} \quad \text{et} \quad K_2 = \frac{Y_2}{X_2}$$

Nous avons pu tracer les courbes $K_1(T)$, $K_2(T)$, $HL(T)$, $HV(T)$ et cela nous donne presque des droites de la forme :

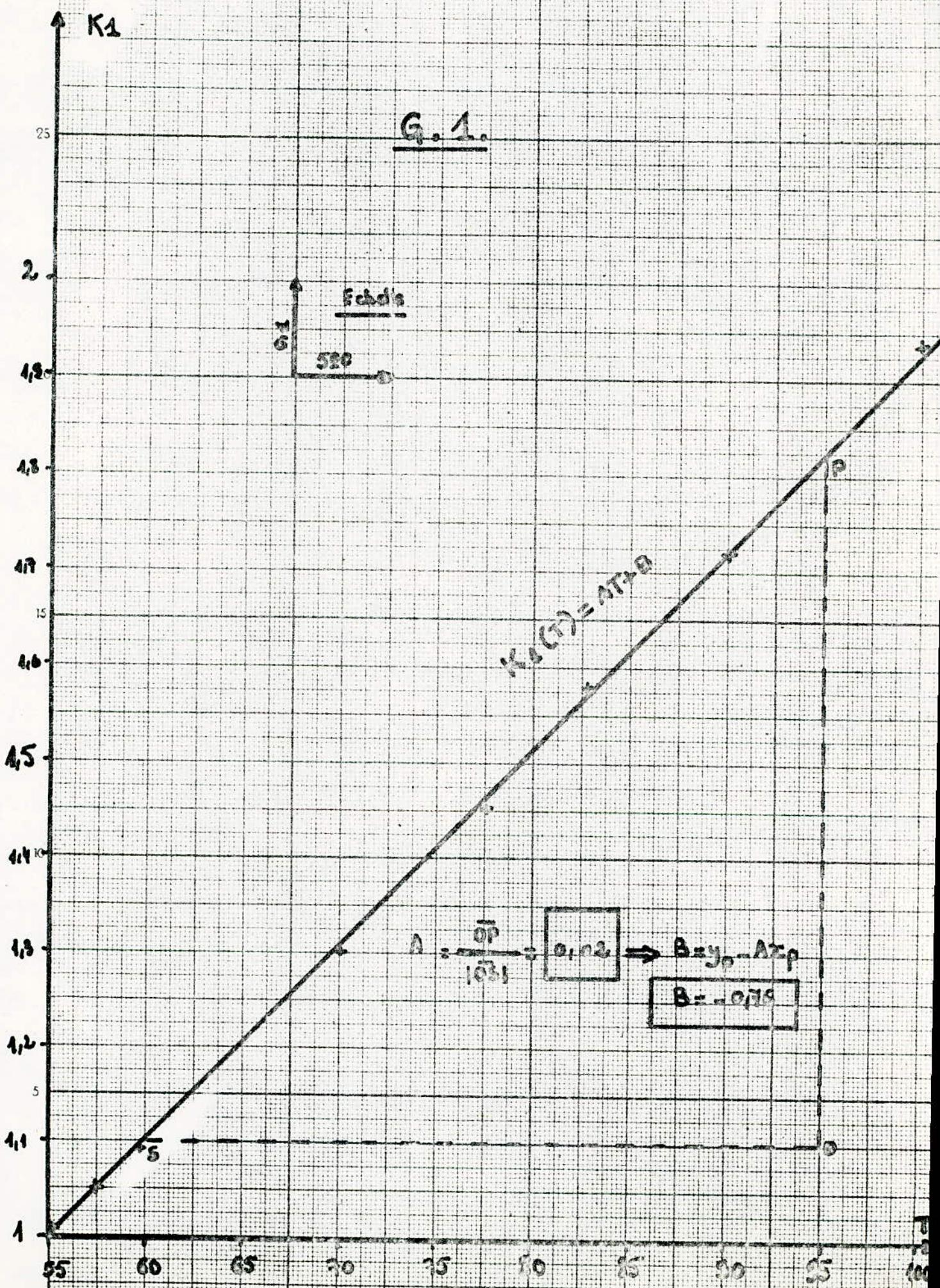
$$\begin{cases} K_1(T) = AT + B \\ K_2(T) = CT + D \end{cases}$$

$$\begin{cases} HL(T) = ET + F \\ HV(T) = GT + H \end{cases}$$

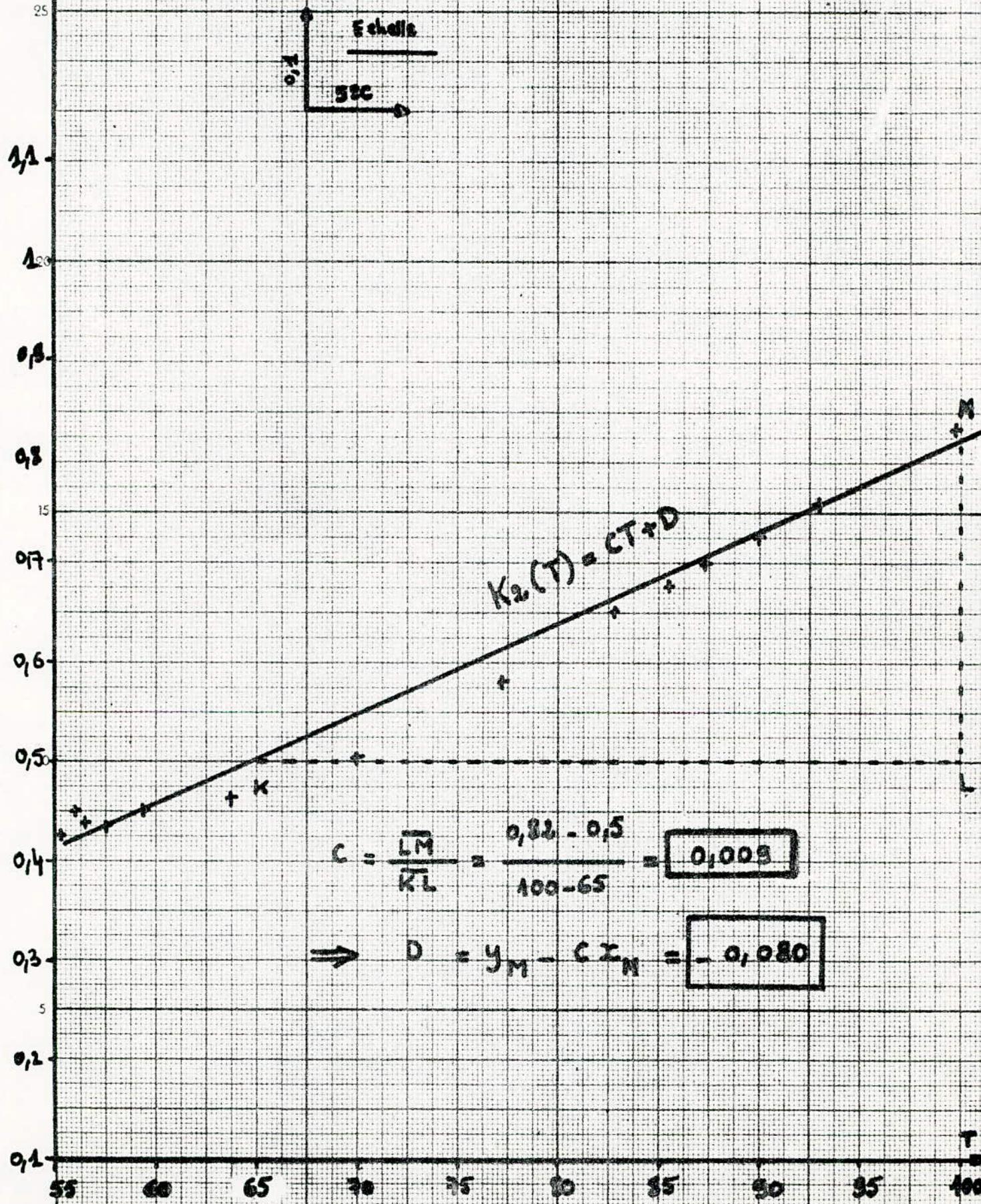
(Voir graphes: G.1 ; G.2. ; G.3. ; G.4.)

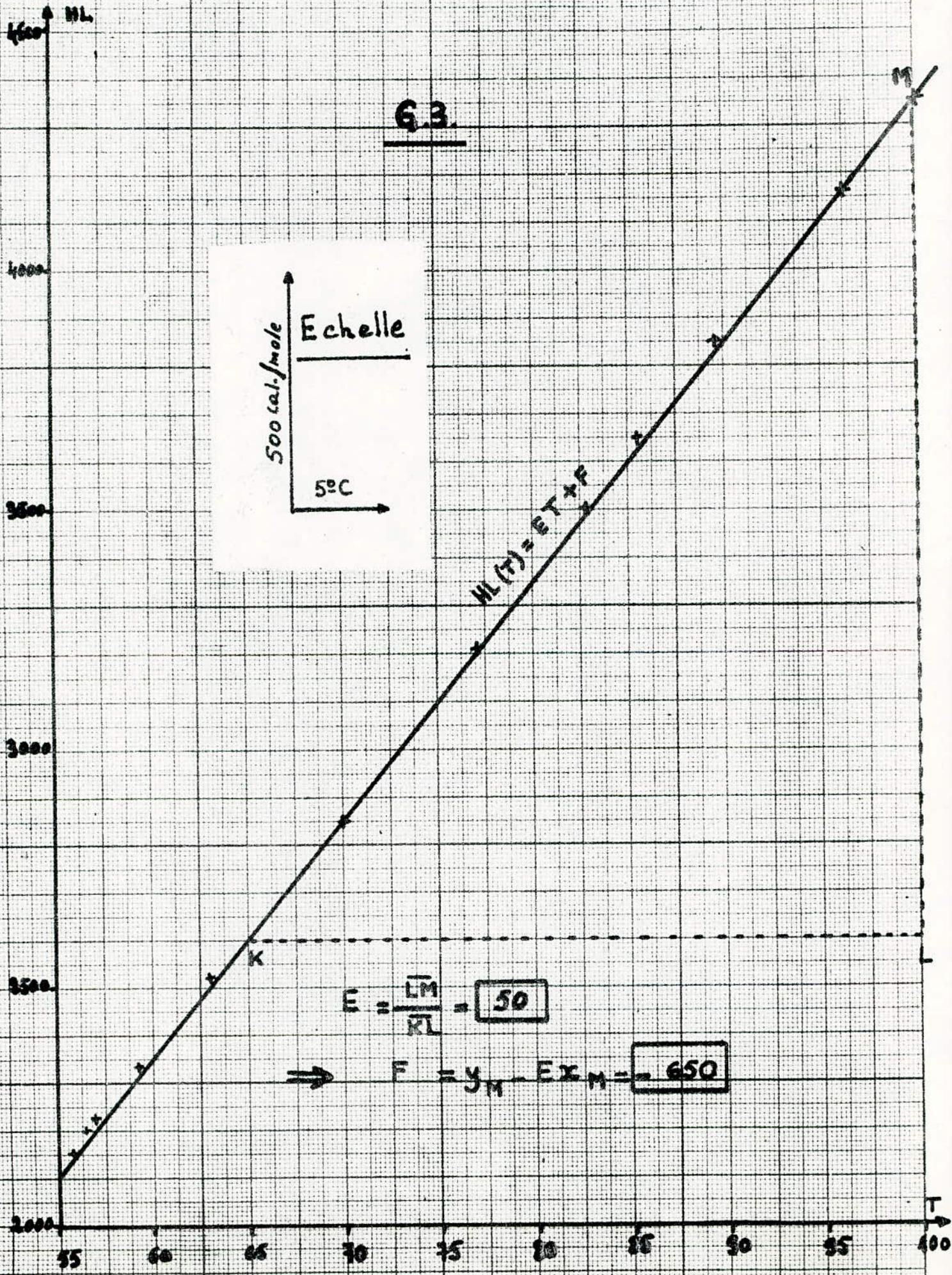
TABLEAU 1

Plateaux	Pression	enthalpie liquide en cal/mole	enthalpie vapeur du mélange en cal/mole	concentration liquide du composant 1.	conc. vapeur du comp. 1.	conc. liquide du comp. 2.	conc. vap. du comp. 2.	coeff. d'équilibre du comp. 1	coeff. d'équilibre du comp. 2.	Température en °C
	17,5 bars	mélange en cal/mole	mélange en cal/mole	: χ_1	: χ_1	$\chi_2 = 1 - \chi_1$	$\gamma_2 = 1 - \gamma_1$	$K_1 = \frac{\chi_1}{\gamma_1}$	$K_2 = \frac{\chi_2}{\gamma_2}$	
1.	2119,428	4998,990	0,993	0,997	0,007	0,003	1,004	0,428	55,241	
2.	2128,822	5001,310	0,988	0,995	0,012	0,005	1,007	0,416	55,450	
	2144,654	5005,941	0,978	0,990	0,022	0,010	1,012	0,454	55,802	
	2173,230	5015,990	0,959	0,982	0,041	0,018	1,023	0,439	56,406	
	2227,564	5039,790	0,924	0,967	0,076	0,033	1,046	0,434	57,530	
	2333,830	5099,982	0,860	0,938	0,140	0,062	1,090	0,442	59,694	
	2533,718	5247,168	0,753	0,886	0,247	0,114	1,176	0,461	63,720	
	2849,044	5535,572	0,611	0,801	0,389	0,199	1,310	0,511	70,015	
	3219,458	5927,372	0,469	0,689	0,531	0,311	1,469	0,585	77,365	
	3497,337	6245,224	0,376	0,595	0,624	0,405	1,582	0,649	82,863	
	3549,044	6304,117	0,360	0,578	0,640	0,422	1,605	0,659	83,893	
	3621,790	6383,731	0,338	0,552	0,662	0,448	1,633	0,676	85,337	
	3720,693	6506,045	0,308	0,516	0,692	0,484	1,675	0,699	87,294	
	3848,705	6660,851	0,270	0,467	0,730	0,533	1,729	0,730	89,821	
	4004,010	6852,287	0,226	0,404	0,774	0,596	1,787	0,770	92,880	
	4178,182	7070,901	0,178	0,331	0,822	0,669	1,859	0,813	96,306	
17.	4357,059	7298,997	0,130	0,252	0,870	0,748	1,938	0,859	99,820	
18.	4524,885	7515,665	0,087	0,174	0,913	0,826	2,000	0,904	103,114	



G. 2.





Scop HV

G. b.

3000

6500

6000

5500

5000

500 cell/m²/s

Echelle

5cc

$$M_{CH} = 67 \times 1$$

$$G = \frac{F}{KL} = 60$$

$$\Rightarrow H = y_H - G x_M = 1300$$

55 60 65 70 75 80 85 90 95

Notre but ici est de calculer à un instant t donné et pour un profil de pression constant, la température T sur chaque plateau de la colonne, les concentrations vapeurs y_{ij} de chaque composant sur chaque plateau et enfin les enthalpies liquide et vapeur du mélange sur chaque plateau, HL et HV.

Cela se fait connaissant les fonctions suivantes:

$$K_1(T) = AT + B$$

$$HL(T) = ET + F$$

$$K_2(T) = CT + D$$

$$HV(T) = GT + H$$

On fixe les concentrations x_{ij} de départ:

$$i = 1, \dots, n_c \quad , \quad j = 1, \dots, n_p$$

Les valeurs peuvent être prises sur un modèle statique.

Dans le cas d'un mélange binaire ($n_c = 2$), compte tenu des formules:

$$\sum_{i=1}^{n_c} x_{ij} \text{ et } j = 1, \dots, n_p; \sum_{i=1}^{n_c} y_{ij} = 1 \text{ et } j = 1, \dots, n_p$$

$$K_{i,j} = \frac{y_{i,j}}{x_{i,j}}$$

$$\text{on a : } \underline{x_{11} \longrightarrow x_{21} = 1 - x_{11}}$$

et delà on écrit:

$$y_{1,j} = K_{1,j} x_{1,j} = (AT_j + B) x_{1,j}$$

$$y_{2,j} = K_{2,j} x_{2,j} = (CT_j + D) x_{2,j}$$

$$\text{or } y_{1,j} + y_{2,j} = 1$$

$$\text{d'où } AT_j X_{1,j} + B X_{1,j} + CT_j X_{2,j} + D X_{2,j} = 1$$

$$(A X_{1,j} + C X_{2,j}) T + B X_{1,j} + D X_{2,j} = 1$$

$$T_j = \frac{1 - B X_{1,j} - D X_{2,j}}{A X_{1,j} + C X_{2,j}}$$

d'où les concentrations vapeurs :

$$Y_{1,j} = (A T_j + B) X_{1,j}$$

$$Y_{2,j} = (C T_j + D) X_{2,j}$$

$$j = 1, \dots, n_p$$

Et les enthalpies liquide et vapeur du mélange

$$HL_j = E T_j + F$$

$$HV_j = G T_j + H$$

$$j = 1, \dots, n_p$$

II.4.2. Deuxième étape:

- Calcul des débits liquides et vapeurs L_j et V_j sur chaque plateau à l'instant t .

Cela peut se faire à l'aide des équations donnant les bilans matériels et thermiques globaux sur chaque plateau.

Les bilans matériels au plateau j s'écrivent:

$$(F_j + V_{j+1} + L_{j-1}) - (V_j + W_j + L_j) = 0 \quad j = 1, \dots, n_p$$

Les bilans enthalpiques s'écrivent sur chaque plateau:

$$(F_j HF_j + V_{j+1} HV_{j+1} + L_{j-1} HL_{j-1}) - (V_j HV_j + W_j HL_j + L_j HL_j) = 0$$

Il y a n_p plateau, pour chaque plateau on écrit le bilan matériel global et le bilan thermique global donc on aura deux équations à deux inconnues pour chaque plateau.

On obtient donc un système linéaire, mais compte tenu d'un bilan matériel et thermique global sur tout la colonne, ce système se résoud en cascade . Cette résolution permet donc d'obtenir les débits liquides et vapeurs sur chaque plateau, chaque système nous délivre V_{j+1} et L_j connaissant V_j et L_{j-1} on aura $2(n_p-1)$ équations à $2(n_p-1)$ inconnues.

La procédure est la suivante:

On divise l'ensemble de la colonne en trois parties isolées l'une de l'autre à savoir:

- a/ - le condenseur comportant le premier plateau.
- b/ - la colonne dans son ensemble (sans condenseur, ni plateau).
- c/ - la colonne comportant les plateaux 2 jusqu'à n_p .

Pour chacun de ces cas on écrit les bilans matériels et thermiques globaux.

* la colonne comporte trois entrées
=====

$F, L(1), Q_B$ et deux sorties $V(2)$ et $L(NP)$.

d'où les bilans matière et thermique
globaux

$$F + LR = V(2) + L(NP) \quad (1)$$

$$F.HF + LR.HL(1) + Q_B = V(2).HV(2) + L(NP).HL(NP) \quad (2)$$

Les inconnues sont $V(2)$ et $L(NP)$

$$(1) \Rightarrow V(2) = F + LR - L(NP).$$

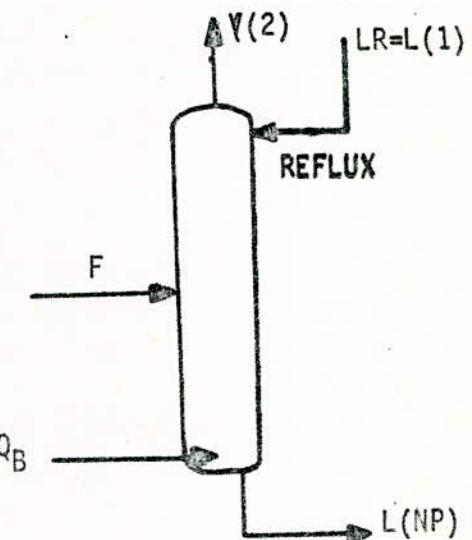
$$(2) \Rightarrow F.HF + LR.HL(1) + Q_B = (F+LR).HV(2) + L(NP).(HL(NP)-HV(2))$$

$$L(NP) = \frac{F.HF + LR.HL(1) + Q_B - (F+LR).HV(2)}{HL(NP) - HV(2)}$$

$$(1) \Rightarrow V(2) = F+LR - L(NP)$$

$$V(2) = F+LR - \frac{F.HF + LR.HL(1) + Q_B - (F+LR).HV(2)}{HL(NP) - HV(2)}$$

N.B. Les notions FL et F utilisées désignent la même quantité.

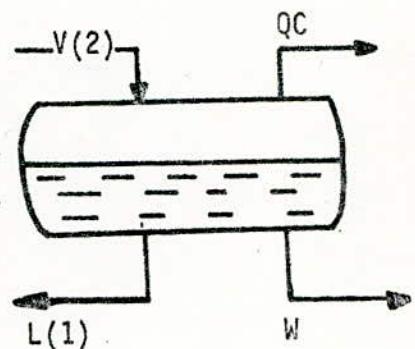


* Le condenseur comporte une entrée V(2)
et trois sorties Q_C , W et $L(1) = LR$.

les bilans matériels et thermiques globaux s'écrivent:

$$(1)' V(2) = L(1) + W$$

$$(2)' V(2).HV(2) = Q_C + W.HL(1) + L(1).HL(1)$$



$$(1)' \Rightarrow \boxed{W = V(2) - L(1)}$$

$$(2)' \Rightarrow Q_C = V(2).HV(2) - (W+L(1)).HL(1)$$

$$Q_C = V(2).HV(2) - \{V(2)-L(1)+L(1)\}.HL(1)$$

$$Q_C = V(2).HV(2) - \{V(2).HL(1)\}$$

$$\boxed{Q_C = V(2) (HV(2) - HL(1))}$$

* Enfin le troisième cas, on considère la colonne comportant les plateaux 2 jusqu'à NP:

On écrit les bilans matériels et thermiques globaux plateau par plateau.

Exemple pour le plateau 2 on a les bilans suivants:

$$L(1) + V(3) = L(2) + V(2) \quad (1)"$$

$$L(1).HL(1) + V(3).HV(3) = L(2).HL(2) + V(2).HV(2) \quad (2)"$$

Les inconnues sont $V(3)$ et $L(2)$:

$$(1)'' \implies V(3) = L(2) + V(2) - L(1)$$

$$(2)'' \implies L(1).HL(1) + \{L(2) + V(2) - L(1)\}.HV(3) = L(2).HL(2) + V(2).HV(2)$$

$$L(1).HL(1) + V(2).HV(3) - L(1).HV(3) - V(2).HV(2) = L(2)\{HL(2) - HV(3)\}$$

$$\boxed{L(2) = \frac{L(1)\{HL(1) - HV(3)\} + V(2)\{HV(3) - HV(2)\}}{HL(2) - HV(3)}}$$

$$V(3) = L(2) + V(2) - L(1)$$

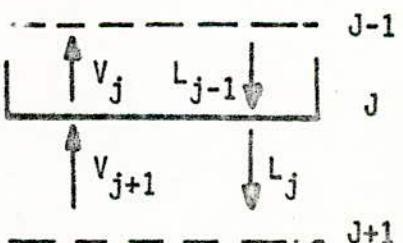
$$\boxed{V(3) = \frac{L(1)\{HL(1) - HL(2)\} + V(2)\{HL(2) - HV(2)\}}{HL(2) - HV(3)}}$$

d'où en général pour un plateau j quelconque différent de JFP, de NP
on a :

Les bilans matières et thermiques suivants:

$$L_{j-1} + V_{j+1} = L_j + V_j$$

$$L_{j-1}.HL_{j-1} + V_{j+1}.HV_{j+1} = L_j.HL_j + V_j.HV_j$$



$$L_j = \frac{L_{j-1} (HL_{j-1} - HV_{j+1}) + V_j (HV_{j+1} - HV_j)}{HL_j - HV_{j+1}}$$

$$V_{(j+1)} = \frac{L_{j-1} (HL_{j-1} - HL_j) + V_j (HL_j - HV_j)}{HL_j - HV_{j+1}}$$

* Bilans matériels et thermiques globaux autour du plateau d'alimentation J = JFP.

$$\begin{array}{c} \text{---} \\ \text{J} = J-1 \\ \text{F} \rightarrow \text{HF} \quad \text{V}_J \quad L_{J-1} \\ \uparrow \quad \downarrow \\ \text{---} \\ \text{J} = JFP \\ \uparrow \quad \downarrow \\ V_{J+1} \quad L_J \end{array}$$

(1)"' F + L_{(J-1)} + V_{J+1} = V_J + L_J

(2)"' F.HF + L_{J-1}.HL_{J-1} + V_{J+1}.HV_{J+1} = V_J.HV_J + L_J.HL_J

$$(1)"' \Rightarrow L_J = F + L_{J-1} + V_{J+1} - V_J$$

$$(2)"' \Rightarrow F.HF + L_{J-1}.HL_{J-1} + V_{J+1}.HV_{J+1} = V_J.HV_J + (F + L_{J-1} + V_{J+1} - V_J)HL_J$$

$$V_{J+1} \{HL_J - HV_{J+1}\} = F.(HF - HL_J) + L_{J-1} (HL_{J-1} - HL_J) + V_J (HL_J - HV_J)$$

$$V_{J+1} = \frac{F.(HF - HL_J) + L_{J-1} (HL_{J-1} - HL_J) + V_J (HL_J - HV_J)}{HL_J - HV_{J+1}}$$

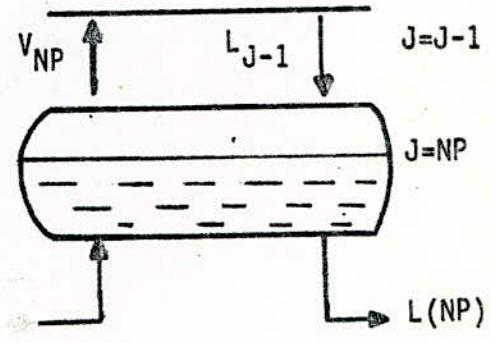
* Bilans matériels et thermiques globaux autour du dernier plateau NP (rebouilleur):

les bilans s'écrivent :

$$V_J + L(J) = L_{J-1} \quad (1)'''$$

$$Q_B + L_{J-1} \cdot HL_{J-1} = V_J \cdot HV_J + L_J \cdot HL_J \quad (2)'''$$

les inconnues sont :



L_{J-1} et V_J

$$(1)''' \Rightarrow \boxed{L_{J-1} = L_J + V_J}$$

$$(2) \quad Q_B + (L_J + V_J) \cdot HL_{J-1} = V_J \cdot HV_J + L_J \cdot HL_J.$$

$$V_J (HL_{J-1} - HV_J) = L_J (HL_J - HL_{J-1}) - Q_B$$

$$\boxed{V_J = \frac{L_J (HL_J - HL_{J-1}) - Q_B}{(HL_{J-1} - HV_J)}}$$

ou d'une autre manière :

$$\boxed{\begin{aligned} L(J) &= V(J+1) + L(J+1) \\ V(J+1) &= \frac{L(J+1) \{HL(J+1) - HL(J)\} - Q_B}{HL(J) - HV(J+1)} \end{aligned}}$$

III.4.3. Troisième étape

Calcul des concentrations liquides à l'instant $T + \Delta T$:

Compte tenu de l'hypothèse de constance de retenues molaires liquides par plateau; ce calcul peut se faire à l'aide des équations de bilan matériel par composant sur chaque plateau.

Ces équations expriment que la quantité de matière entrant sur chaque plateau est égale à la quantité de matière sortant, plus celle qui s'accumule pendant le temps ΔT ; pour chaque constituant.

Soit:

Sur un plateau nous avons :

$$\begin{aligned} & \Delta T(FL_j Z_{i,j} + L_{j-1} X_{i,j-1} + V_{j+1} K_{i,j+1} X_{i,j+1} - V_j K_{i,j} X_{i,j}) \\ & - W_j X_{i,j} - L_j X_{i,j} = U_j (X_{i,j} - X_{i,j}) \end{aligned}$$

Cette équation peut s'écrire sous la forme suivante :

$$\begin{aligned} & L_{j-1} X_{i,j-1} - (L_j + W_j + V_j K_{i,j} + \frac{U_j}{\Delta T}) X_{i,j} \\ & + V_{j+1} K_{i,j+1} X_{i,j+1} = - FL_j Z_{i,j} - \frac{U_j}{\Delta T} X_{i,j} \end{aligned}$$

Nous écrivons ce bilan matière sur chaque plateau, nous obtenons ainsi NC systèmes linéaires tridiagonaux de la forme $AX = B$.

A étant une matrice carrée tridiagonale de dimension (NP,NP).

B étant un vecteur à NP composantes.

Ces systèmes peuvent se résoudre par la méthode directe (GAUSS).

Nous calculons donc les $X_{i,j}$ à chaque instant; l'intervalle de temps ΔT est fixé.

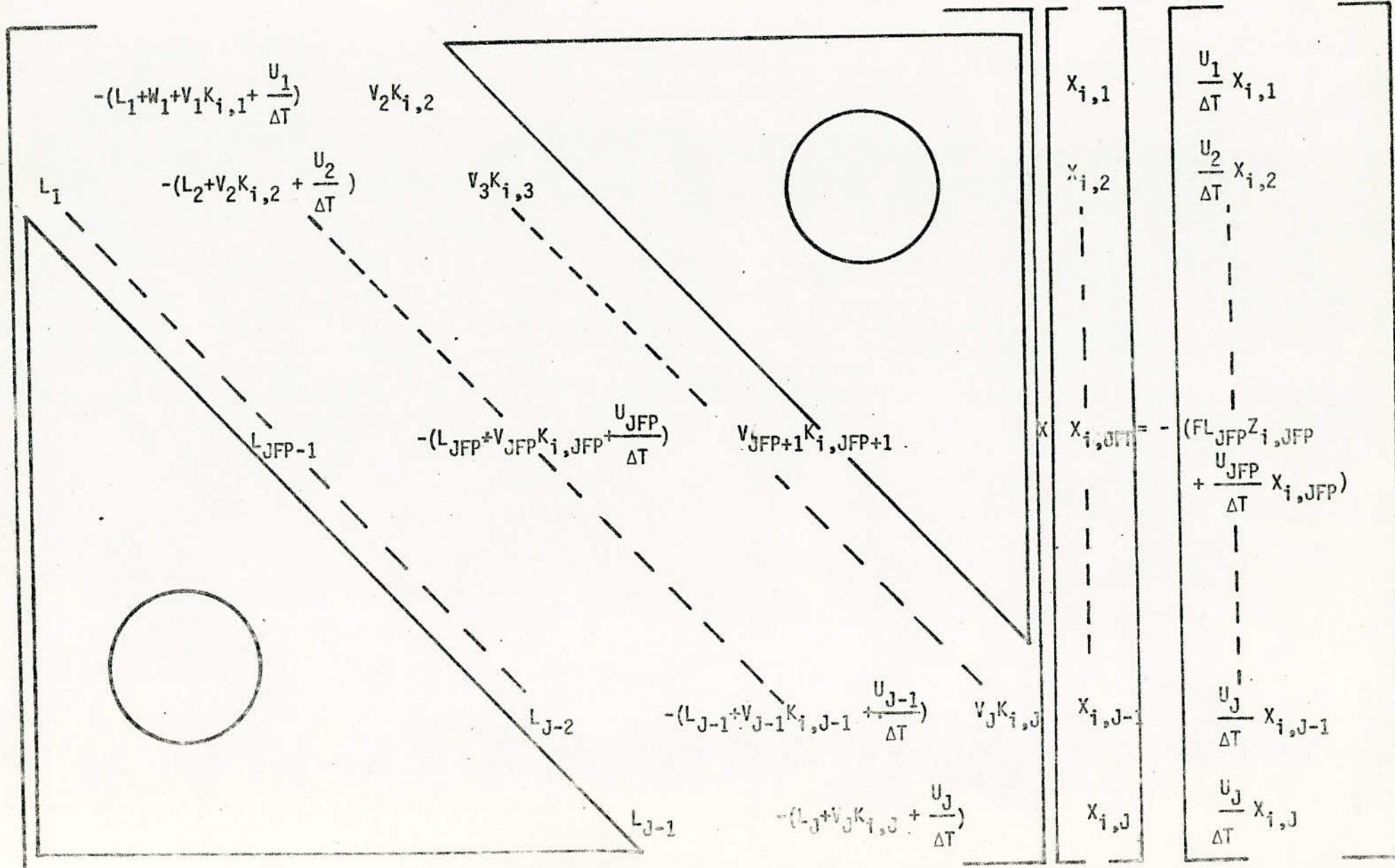
Nous faisons tourner notre programme de résolution jusqu'à ce que la colonne atteigne son état d'équilibre (régime permanent).

A cet état nous n'avons plus d'évolutions de paramètres.

Après avoir normalisé les concentrations de cet état, nous considérons ce dernier comme état initial, nous faisons un échelon sur le débit de reflux ou sur la quantité de chaleur du rebouilleur par exemple, le processus recommence pour atteindre un nouvel état d'équilibre. Cela va nous permettre de bien vérifier le fonctionnement de la colonne.

REPRESENTATION DU SYSTEME A RESOUDRE (AX=B)

$i = 1, \dots, N_C ; j = 1, \dots, N_P$



Remarques :

- La résolution du système $AX = B$ nous donne la concentration d'un constituant sur chaque plateau.
D'où dans le cas d'un mélange binaire, la concentration du constituant "deux" s'obtient à l'aide de la formule suivante:

$$\sum_{i=1}^2 x_{i,j} = 1 \quad j = 1, \dots, NP$$

$$x_{2,j} = 1 - x_{1,j}.$$

- La quantité de soutirage liquide W_j intervient uniquement au plateau 1 ($j = 1$ "condenseur").
- Le débit d'alimentation FL_j intervient uniquement au plateau d'alimentation ($J = JFP$).

TROISIEME PARTIE
- SIMULATION -

III.SIMULATION DYNAMIQUE

III.1. ALGORITHME DE RESOLUTION DU MODELE DYNAMIQUE

* Lecture de données:

NP, NC, JFP, U(J), Z(I), FL, A, B, C, D, E, F, G, H, QB, LR, HF,
XM(I,J) initiaux, DT, NDT.

* Appel au sous-programme de calcul des équilibres liquide-vapeur (CAEQLV).

- calcul des $K_{i,j}$.

* Appel au sous-programme de bilans matières et thermiques globaux (BIMATG)

Traitemet:

(1) * Appel au sous-programme de remplissage de la matrice A et du vecteur B

- Calcul des concentrations X à l'instant T+ΔT.

- Normalisation de ces concentrations à l'aide de la formule

$$X_i = \frac{X_i}{\sum_{i=1}^{NC}}$$

* Appel au sous-programme contrôle (C0NTR0)

- Si les concentrations calculées à l'instant T + n ΔT sont égales aux concentrations de l'état T + (n - 1) ΔT, on arrête ce traitement et on a:

(2) L'état d'équilibre

- Aller en (3)

- Sinon:

* Appel au sous-programme de calcul des équilibres liquide-vapeur (CAEQLV) puis, sauvegarde des concentrations précédemment calculées en (2) pour les comparer avec celles qui seront prochainement calculées.

* Appel au sous-programme (BIMATG)

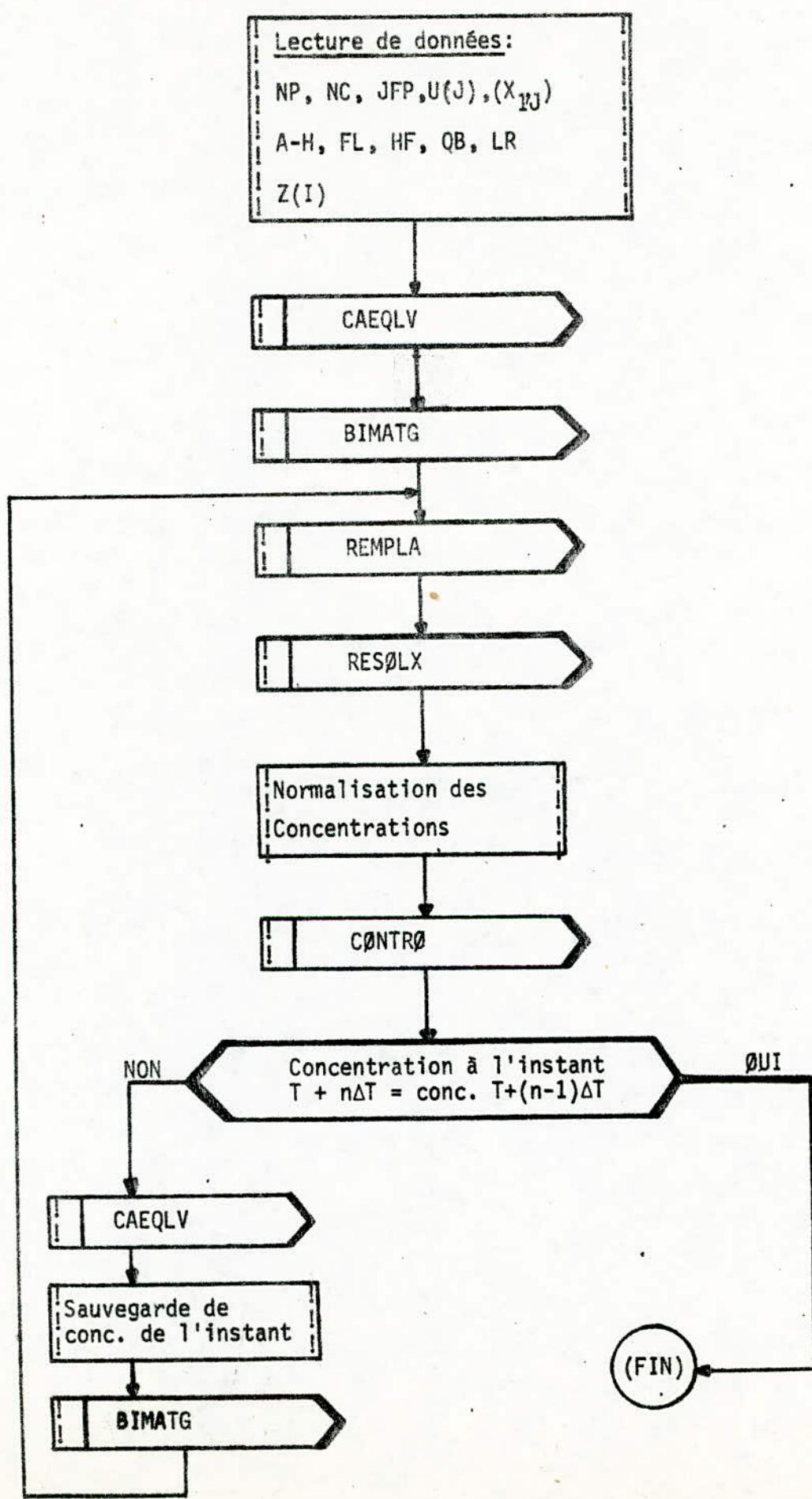
- Aller en (1)

(3) Fin

III.2. NOTATIONS UTILISEES DANS LES PROGRAMMES ECRITS:

- NP : nombre de plateaux de la colonne.
NC : nombre de composants du mélange.
JFP : n° plateau d'alimentation.
IFP : n° du composant.
 $XM(I,J)$: concentration liquide du composant I sur le plateau J.
 $U(J)$: Accumulation molaire sur le plateau J.
 $L(J)$: débit liquide du mélange sur le plateau J.
 $V(J)$: débit vapeur " " J.
 $HV(J)$: Enthalpie vapeur " " J.
 $HL(J)$: Enthalpie liquide " " J.
FL : débit d'alimentation.
HF : Enthalpie d'Alimentation.
LR : Reflux.
 $Z(I)$: Concentration du composant I dans le débit FL.
QB : Puissance thermique du rebouilleur.
QC : Puissance thermique du condenseur.
A,C,E,G, = pentes des droites: $K_1(T)$, $K_2(T)$, $HL(T)$, $HV(T)$.
B,D,F,H, = ordonnées à l'origines des droites: $K_1(T)$, $K_2(T)$, $HL(T)$, $HV(T)$.
T(J) : Température sur le plateau J.
DT : Ecart entre les instants.
NDT : Nombre d'itérations.

III.3. Organigramme principal de déroulement des étapes de calcul:

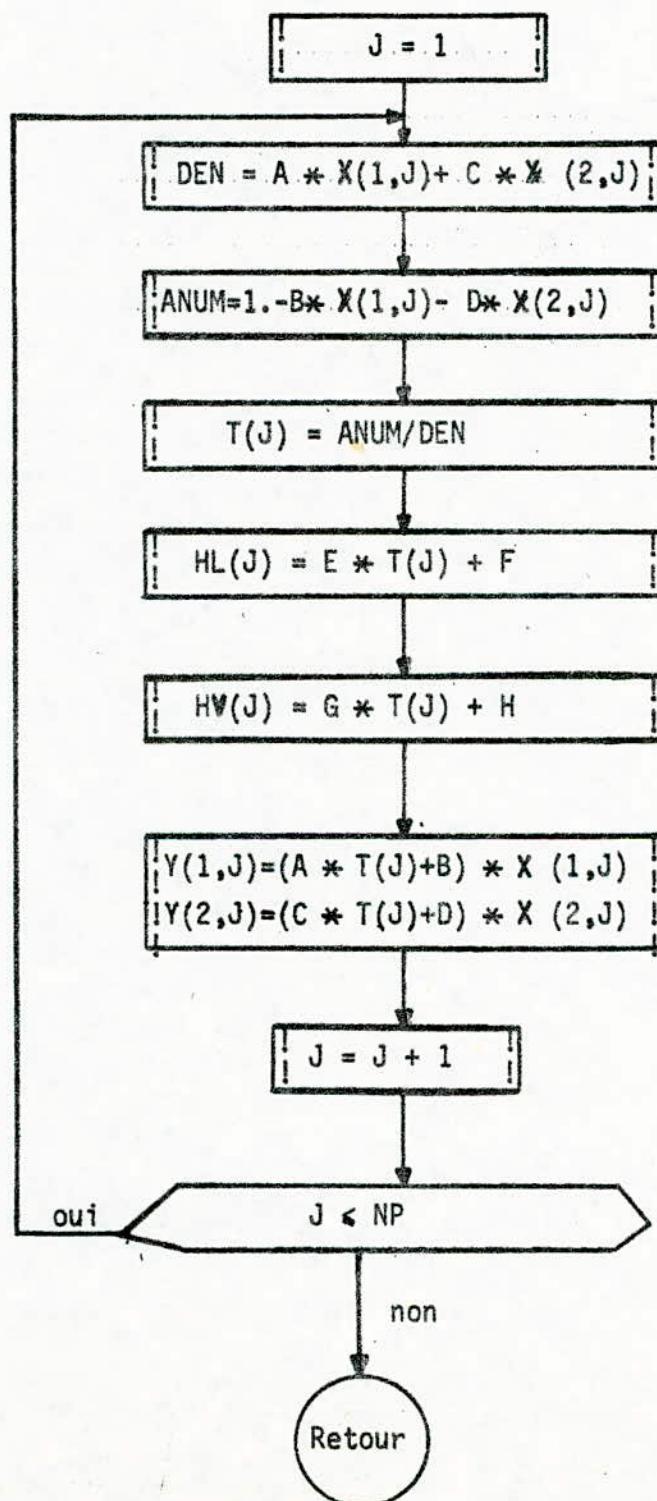


III.4. Organigramme de calcul des équilibres liquide-vapeur

Nom du S/programme: CAEQLV

Entrées : XM(I,J), A, B, C, D, E, F, G, H, NP.

Sorties: T(J), HL(J), HV(J), Y(I,J)

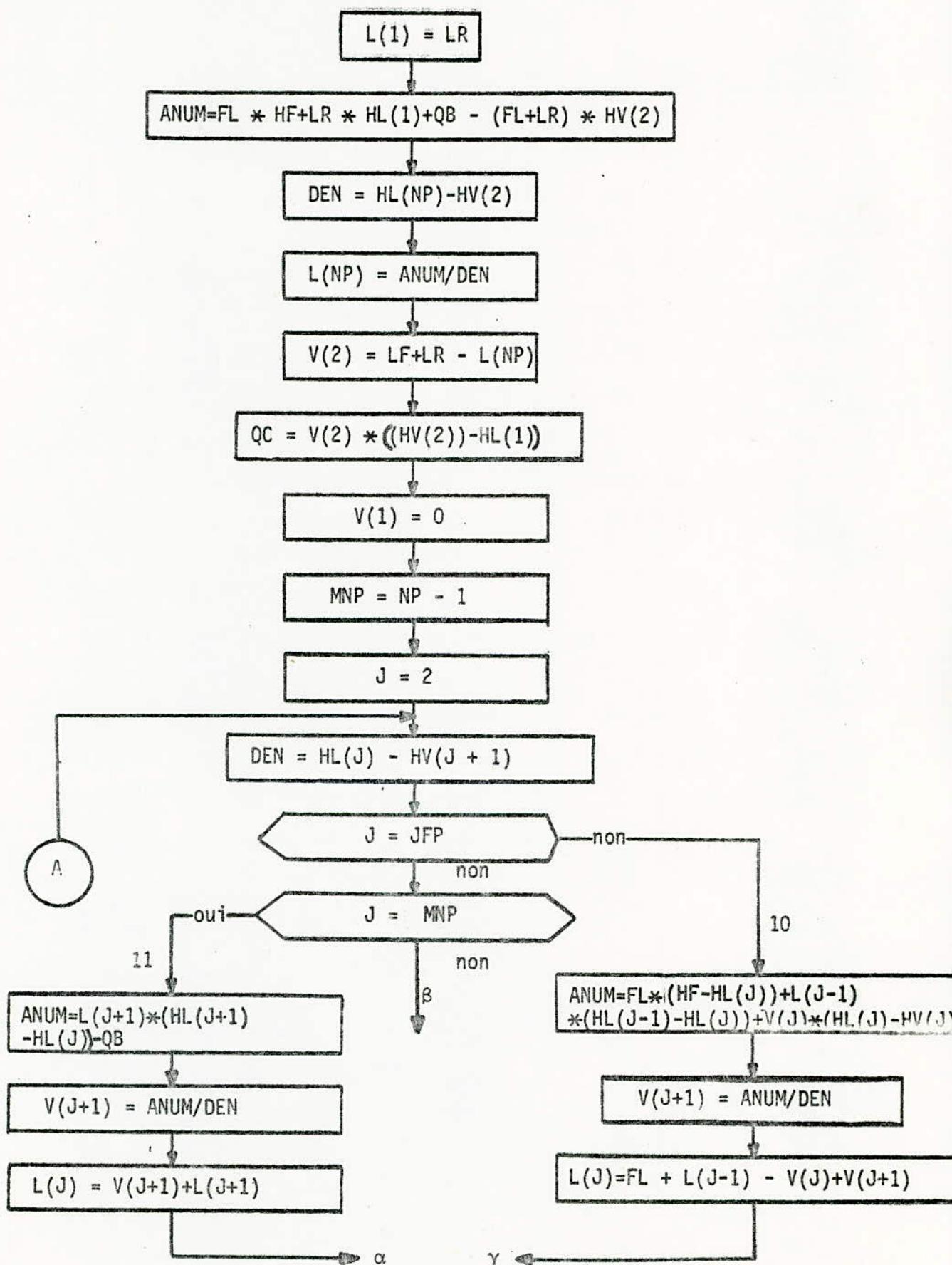


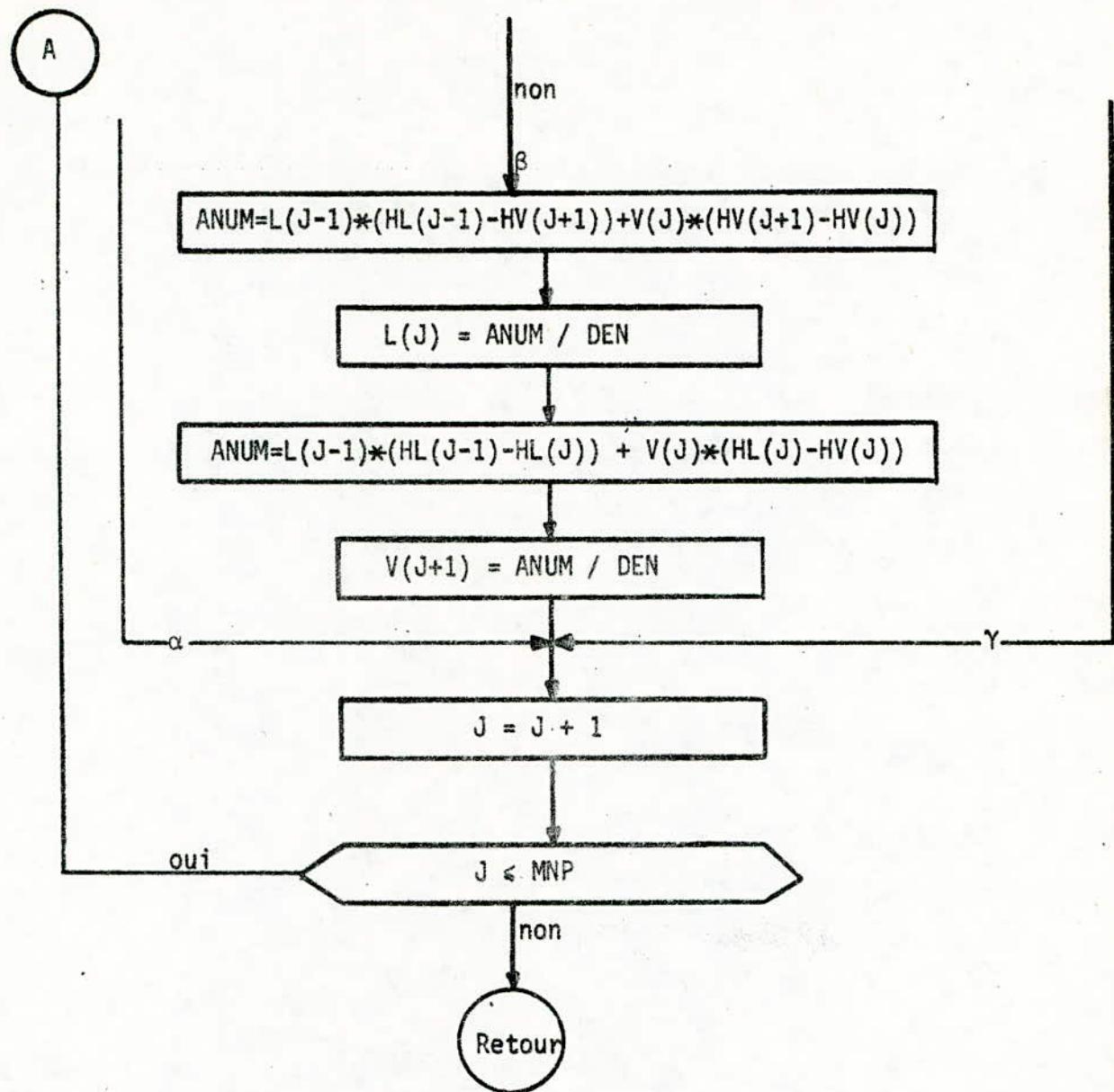
III.5. Organigramme de calcul des débits liquides et vapeurs ($L(J)$, $V(J)$)

Nom du S/programme: BIMATG

Entrées: LR, QB, FL, HF, HL(J), HV(J), NP, JFP.

Sorties: L(J), V(J), W, QC.



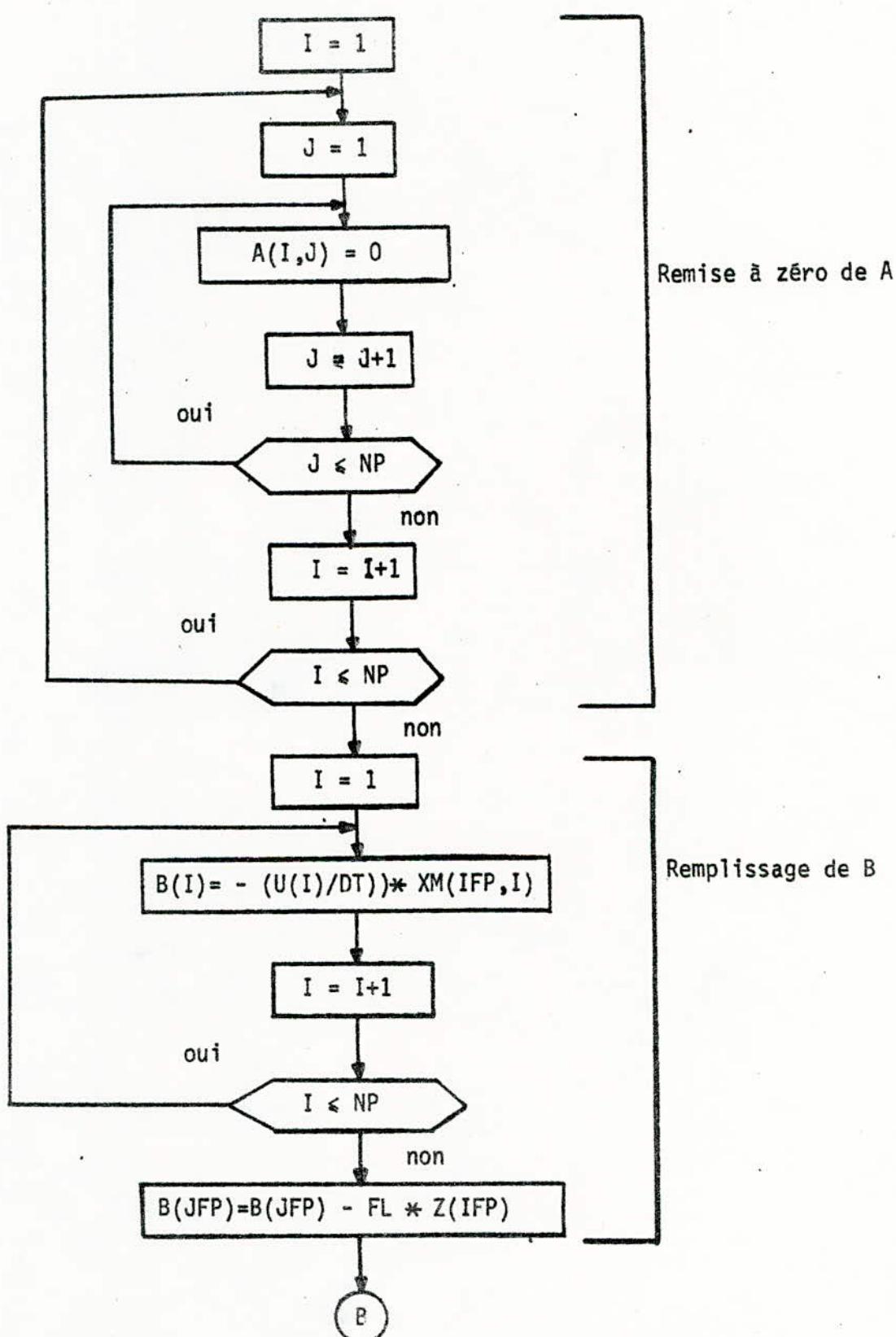


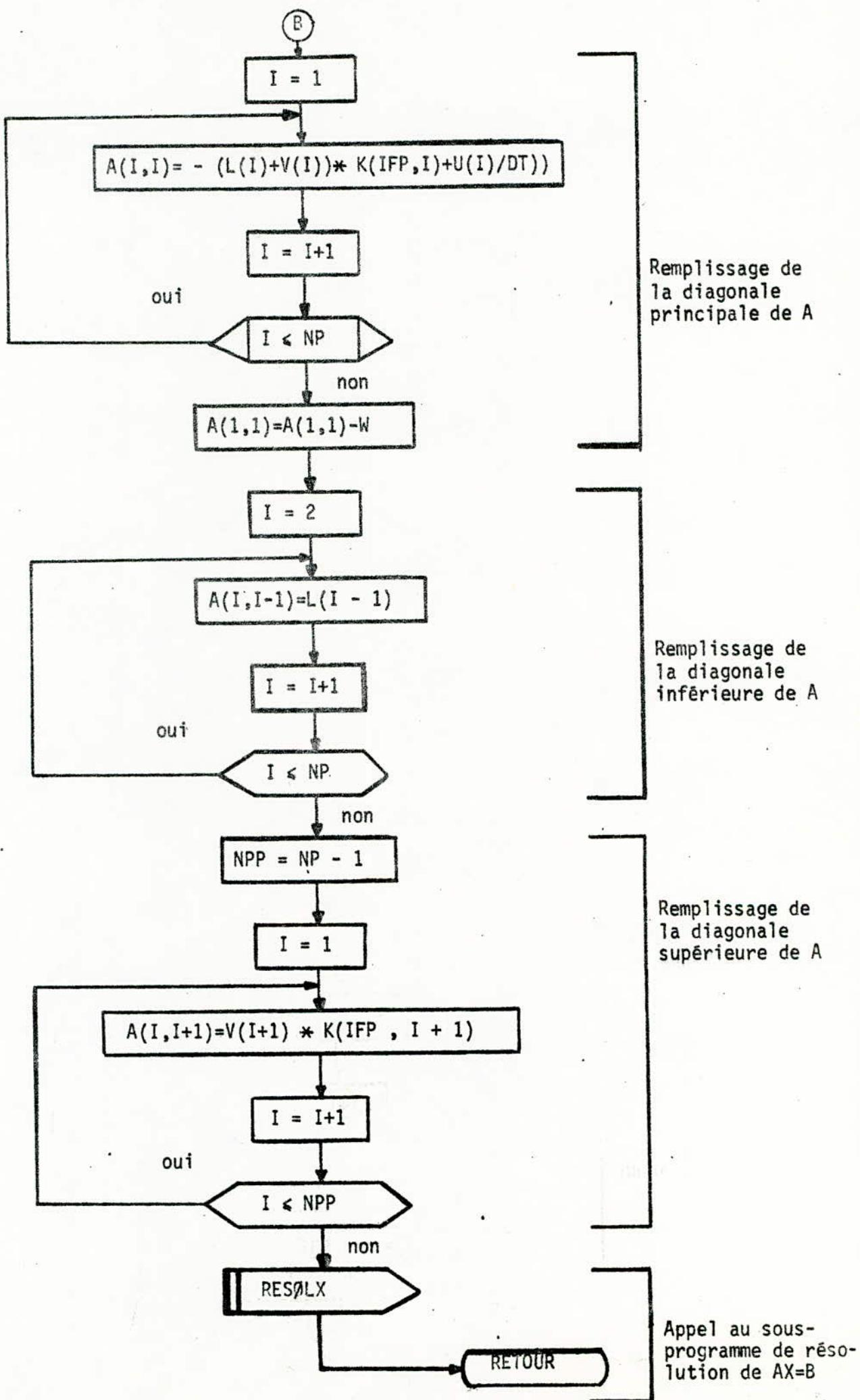
III.6. Organigramme de remplissage de la matrice A_{ij} et du vecteur B_j

Nom du S/programme: REMPLA

Entrées: $L(J)$, $V(J)$, $K_{i,j}$, W , FL , Z_i , NP , JFP , IFP , $U(J)$, $W(J)$, $XM(I,J)$

Sorties: $X(I,J)$





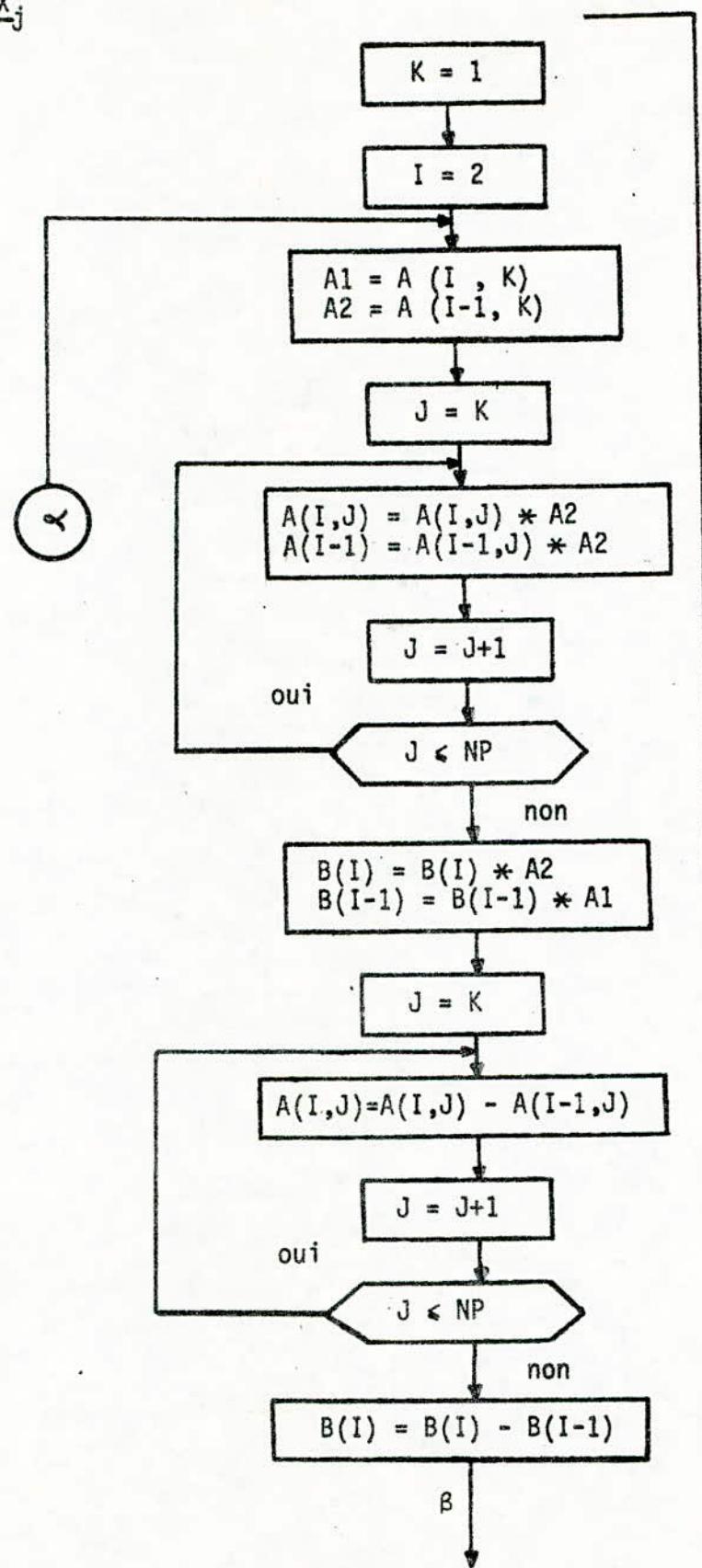
III.7. Organigramme de résolution du système AX=B donnant les concentrations

à l'instant $T+\Delta T$

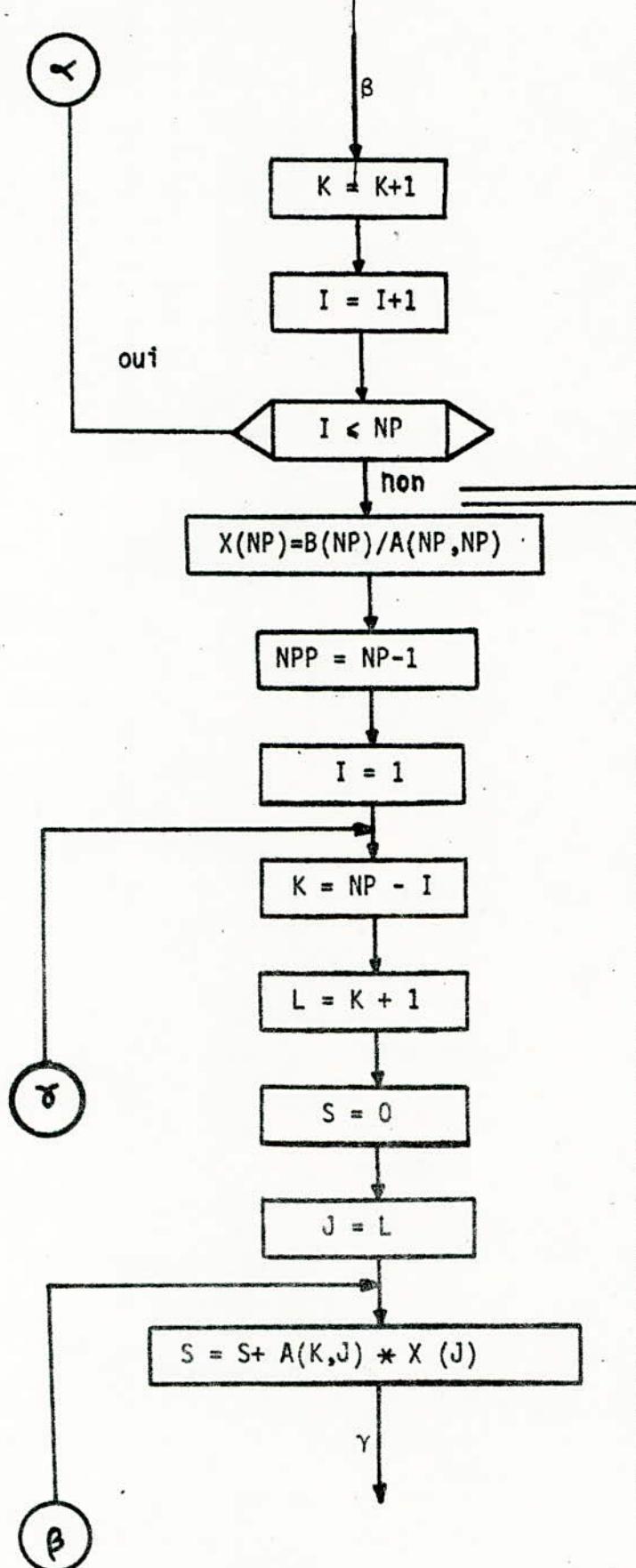
Nom du S:programme: RESOLX

Entrées: A_{ij} , B_j NP.

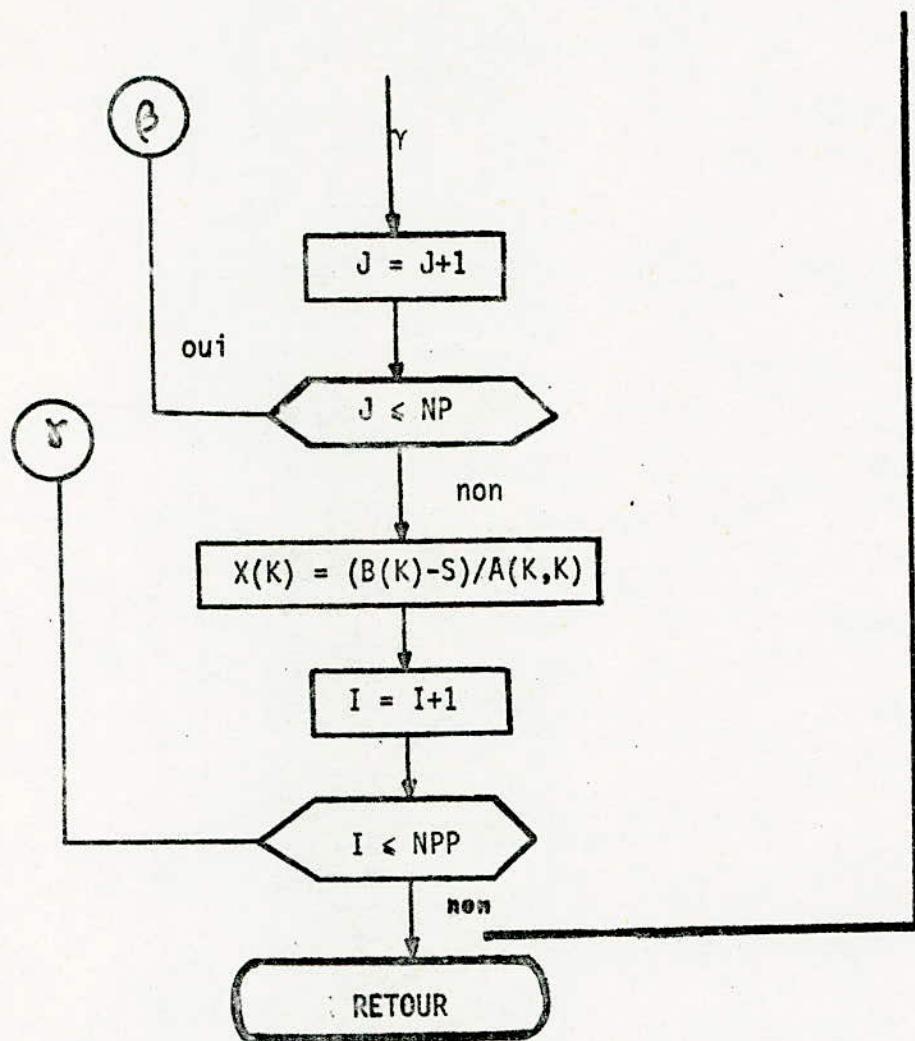
Sortie : X_j



Triangularisation
de la matrice $A_{i,j}$



RESOLUTION DE AX=B



III.8 Organigramme de Contrôle de l'état d'équilibre

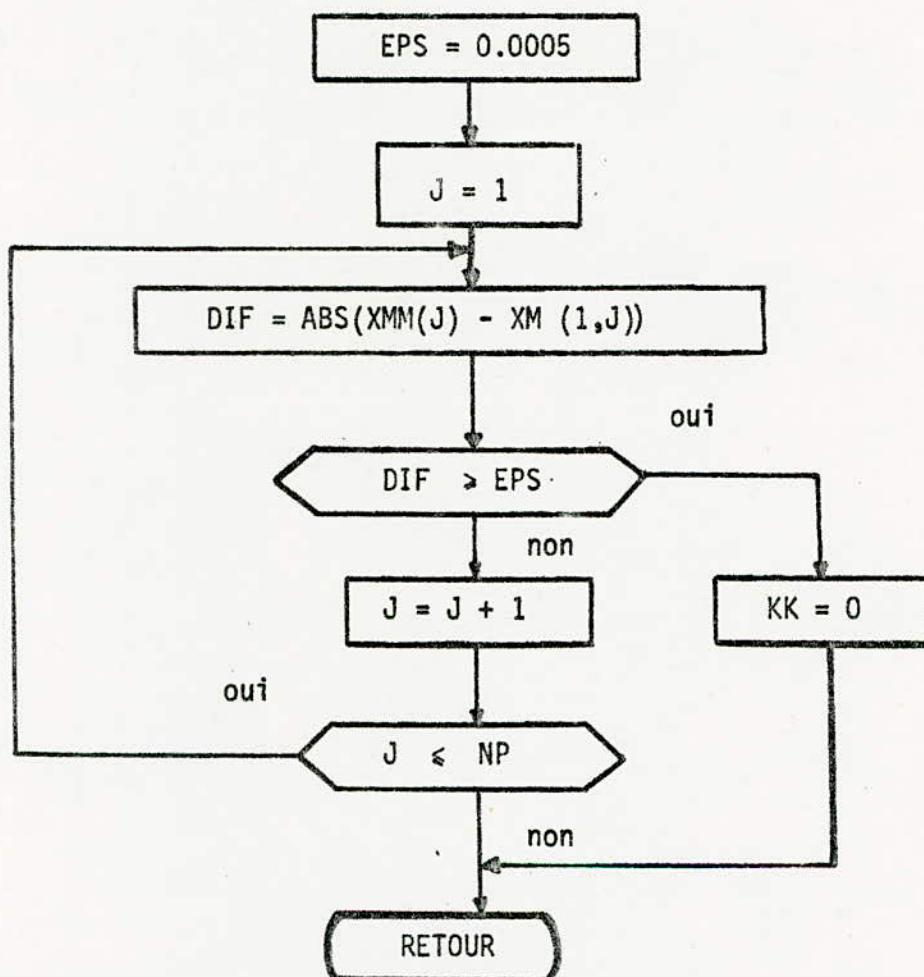
Nom du S/programme : CONTR0 =

Entrées : XMM(J) : Concentrations à l'instant $(T + (n-1)\Delta T)$, KK = 1

XM(J) : Concentrations à l'instant $(T + n \Delta T)$

Sorties: Indicateurs: KK = 0 état transitoire

KK = 1 état d'équilibre



C PROGRAMME PRINCIPAL
C

```
REAL LR
REAL L(20),K(3,20),HL(20),HV(20),V(20)
DIMENSTON Y(3,20),Z(3),L(20),X(20),XM(3,20),T(20)
DTMENSTON XM(20)
IJ=0
QLR=30.
QGR=50000.
PRNTNT 555
READ(105,100) NP,NC,JFP
100 FORMAT (3T2)
      WRITE(108,700) NP,NC,JFP
700 FORMAT (1X,'NP= ',T2,5X,'NC= ',IP,5X,'PLAT. D"ALTM.= ',T2/)
      WRITE(108,101)
101 FORMAT(//10X,'E T A T T N T T A L'//10X,23(''-'')//)
      READ(105,200)(U(I),I=1,NP)
200 FORMAT (9F7.3)
      WRITE(108,999)U(1),U(2),U(20)
999 FORMAT(' ACCUMUL. :'' PLATEAU 1 :'',F7.3,' MOLES',6(''-''),'PLATEAUX
 - 2 A 19 :'',F5.3,' MOLES',6(''-''),'PLATEAU 20 :'',F6.3,' MOLES'')
      READ(105,400)(Z(T),T=1,NC)
400 FORMAT(3F5.3)
      WRITE(108,998)Z(1),T=1,NC)
998 FORMAT(' CONCENTRATIONS D"ALTM. :'/1X, 'C3 : ',F4.3,6X,'C4 : ',F4
 - .3)
      READ(105,500) FL,A,B,C,D,E,F,G,H
500 FORMAT (9F8.3 )
      WRITE(108,901)A,B,C,D,E,F,G,H
901 FORMAT(/6X,1HA,10X,1HR,1CX,1HC,10X,1HD,10X,1HF,10X,1HF,10X,1HG,10X
 - ,1HH/9(1H,,1Y,F8.3,1X)/)
      READ(105,600) QB, LR, HF
600 FORMAT(F7.0,2F8.3)
      READ(105,300)(XM(1,J),J=1,NP)
300 FORMAT (16F5.3)
      READ(105,150) DT,NDT
150 FORMAT (F6.0,T2)
      DO 10 J=1,NC
10 XM(2,J)=1.-XM(1,J)

C APPEL AU SOUS-PROGRAMME .CAEGLV.
C ( CALCUL DES EQUILIBRES , LTOUTDE ET VAPEUR .
C
CALL CAEGLV (XM,Y,T,A,B,C,D,E,F,G,H,HL,HV,NP)
DO 40 J=1,NP
  DO 40 I=1,NC
40 K(I,J)=Y(I,J)/XM(I,J)
  GO TO 111
80 WRITE (108,900) FL,HF,QB,LR
 -,9C
111 CONTINUE
```

C
C APPEL AU SOUS-PROGRAMME .RIMATG.
C (BILANS MATERIE ET THERMIQUE GLOBAUX)
C

CALL BINATG(LR,QR,FL,HF,FL,HV,V,L,GC,W,NP,JFP)

IF(JJ.NE.0)GO TO 66

WRITE(108,900)FL,HF,QR,LR,GC

900 FORMAT(' DEBIT D''ALTM.',6X,'ENTH. D''ALIM.',6X,'REFFLUX',
--8X,'QC',5X,F6.3,13X,F8.3,7X,F7.0,4X,F7.3,3X,F10.3/5X,'MOLES/S',12X
--,'CAL/MOLE',7X,'CAL./S.',4X,'MOLES/S',5X,'CAL./S')

WRITE(108,972)DT

972 FORMAT(' DT =',F4.0,' SECONDES')

WRITE(108,969)

WRITE(108,970)((XM(M,N),M=1,NC),(Y(M,N),M=1,NC),(K(M,N),M=1,NC),
-L(N),V(N),HL(N),HV(N),T(N),N=1,NP)

970 FORMAT(20(4(' *',F5.3),2(' *',F6.3),2(' *',F8.3),2(' *',F9.3),2(' *',
-F8.3,' */1X,4(' *',6X),2(' *',7X),2(' *',8X),2(' *',10X),' *',9X,' *'))
-))

WRITE(108,971)

PRINT 555

66 DO 20 J=1,NP

DO 30 IFF=1,NC

C APPEL AU SOUS-PROGRAMME .REMPLA.

C (REMPLISSAGE DE LA MATRICE A ET DU VECTEUR B.
C PUIS RESOLUTION DU SYSTEME A.X = B)

CALL REMPLA(L,V,K,W,FL,Z,NP,JFP,IFF,U,DT,X,XM)

DO 30 J=1,NP

XN(IFF,J)=X(J)

DO 60 N=1,NC

XN(1,N)=XN(1,N)/(XN(1,N)+XN(2,N))

60 XN(2,N)=1-XN(1,N)

KK=1

C APPEL AU S./P. .CONTRO.

C (CONTROLE DE L'ETAT D'EQUILIBRE)

CALL CONTRO(XMM,XM,KK)

C APPEL AU SOUS-PROGRAMME .CAEGLV.

C (CALCUL DES EQUILIBRES , LIQUIDE ET VAPEUR)

CALL CAEGLV (XM,Y,T,A,P,C,D,E,F,G,H,HL,HV,NP)

DO 50 M=1,NC

XMM(M)=XM(1,M)

DO 50 N=1,NC

50 K(N,M)=Y(1,M)/XM(M,M)

C APPEL AU SOUS-PROGRAMME .RIMATG.

C (BILANS MATERIE ET THERMIQUE GLOBAUX)

CALL BINATG (LR,QR,FL,HF,FL,HV,V,L,GC,W,NP,JFP)

IF(KK.EQ.1)GO TO 55

WRITE(108,960) I

960 FORMAT (1X, ' RESULTATS A L''INSTANT T+',I2,'DT//')

WRITE(108,969)

969 FORMAT(65X,'COLONNE BINAIRE ("DEPRECANISEUR")//98(' *')//',4(' C
-NC,*'), 2(' COEF. *'),2(' DEBIT *'),2(' ENTH. *'), ' TEMP.
- * */1X,'*LTG.C3*LIQ.C4*VAP.C3*VAP.C4*EQU.C3 *EQU.C4 * LTQ. * V
-AP. * LIQUIDE * VAPEUR * EN * */1X,4(' *',6X),2(' *',7X),2(' *',
- MOLES/S'),2(' * CAL/MOLE'), ' DEG.C *' /98(' *')/1X,4(' *',6X)
- ,2(' *',7X),2(' *',9X),2(' *',10X),' *',9X,' *')

WRITE(108,970)((XM(M,N),M=1,NC),(Y(M,N),M=1,NC),(K(M,N),M=1,NC),
-L(N),V(N),HL(N),HV(N),T(N),N=1,NP)

WRITE(108,971)

CONTINUE

C
C CAS OU IL Y'A ETAT D'EQUILIBRE .
C

55 PRTNT 555
555 FORMAT(1H1)
T=T-1
WRITTE(108,997)T
997 FORMAT(' E T A T D " F C U T L I B R E "/33(''-'),' A L"INSTANT T
-+',I2,' DT.'//)
WRITTE(108,900)FL,HF,QR,LR
-,QC
WRITTE(108,969)
WRITTE(108,970)((XM(M,N),M=1,NC),(Y(M,N),M=1,NC),(K(N,N),N=1,NC),
-L(N),V(N),HL(N),HV(N),T(N),N=1,NP)
WRITTE(108,971)
971 FORMAT(1H+,971'*')
PRTNT 555
JJ=JJ+1
TF (JJ.EQ.5) GOTO 90
LL=JJ/3+1
GO TO 1(11,12),LL

C
C DIMINUTION OU AUGMENTATION DE LR .
C

C SI JJ IMPAIR ON LE DIMINUE.
C SI JJ PAIR ON L'AUGMENTE .

11 LR=LR+((-1)**TJ)*CLR
TF(MOD(JJ,2).EQ.0)LR=LR+CLR
GO TO 80

C
C DIMINUTION OU AUGMENTATION DE LR .
C

C SI JJ IMPAIR ON LE DIMINUE.
C SI JJ PAIR ON L'AUGMENTE .

12 QB=QB+((-1)**JJ)*QCB
TF(MOD(JJ,2).EQ.0)QB=QB+QCB
GOTO 80
90 STOP
END

C SOUS - PROGRAMME C A F C L V

C SUBROUTINE CAFCLV (X,Y,T,A,B,C,D,F,G,H,HL,HV,NP)

C DIMENSION X(3,20),Y(3,20),T(20),HL(20),HV(20)

C DO 10 J=1,NP

C DEN=A*X(1,J)+C*X(2,J)

C ANUM=B*X(1,J)-D*X(2,J)

C CALCUL DE LA TEMPERATURE SUR LE PLATEAU J.

T(J)=ANUM/DEN

C CALCUL DE L'ENTHALPIE LIQUIDE SUR LE PLATEAU J.

HL(J)=F*T(J)+F

C CALCUL DE L'ENTHALPIE VAPEUR SUR LE PLATEAU J.

HV(J)=G*T(J)+H

C CALCUL DES CONCENTRATIONS VAPEURS SUR LE PLATEAU J.

Y(1,J)=(A*T(J)+B)*X(1,J)

Y(2,J)=(C*T(J)+D)*X(2,J)

RETURN

END

SOUIS - PROGRAMME B T M A T G

SURROUITE BTMAG (LR,OB,F,HF,HL,HV,V,L,OC,W,NP,JFP)
REAL LR
REAL L(20)
DTMENSTON HL(20),HV(20),V(20)
L(1)=LR
ANUM=F*HF+LR*HL(1)+OB-(F+LR)*HV(2)
DEN=HL(NP)-HV(2)
L(NP)=ANUM/DEN
V(2)=F+LR-L(NP)
W=V(2)-LR
OC=V(2)*(HV(2)-HL(1))
MNP=NP-1
V(1)=0.
DO 20 J=2,MNP
DEN=HL(J)-HV(J+1)
TF(J,ER,JFP) GOTO 10
TF(J,ER,MNP) GOTO 11
ANUM=L(J-1)*(HL(J-1)-HV(J+1))+V(J)*(HV(J+1)-HV(J))

CALCUL DES DEBITS LTOUTES DU PLATEAU J ET VAPEUR DU PLATEAU J+1

L(J)=ANUM/DEN
ANUM=L(J-1)*(HL(J-1)-HL(J))+V(J)*(HL(J)-HV(J))
V(J+1)=ANUM/DEN
GOTO 20
ANUM=F*(HF+HL(J))+L(J-1)*(HL(J-1)-HL(J))+V(J)*(HL(J)-HV(J))

CALCUL DES DEBITS LTOUTES DU PLATEAU D'ALIMENTATION JFP ET VAPEUR DU PLATEAU JFP+1

V(J+1)=ANUM/DEN
L(J)= F+L(J-1)-V(J)+V(J+1)
GOTO 20
ANUM=L(J+1)*(HL(J+1)-HL(J))-OB

CALCUL DES DEBITS VAPEUR DU DERNIER PLATEAU NP ET LTOUTE DU PLATEAU NP-

V(J+1)=ANUM/DEN
L(J)=V(J+1)+L(J+1)
CONTINUE
RETURN
END

C SOUS - PROGRAMME REMPLA
C
C SUBROUTINEREMPLA(L,V,K,W,F,Z,NP,JFP,IFP,U,DT,X,XM)
REAL(L,20),K(3,20)
DIMENSION V(20),Z(31),U(20),A(20,20),B(20),X(20),XM(3,20)
C
C INITIALISATION DE LA MATRICE A A ZERO
C
D010 I=1,NP
D010 J=1,NP
10 A(I,J)=0.
C
C REMPLISSAGE DU VECTEUR B
C
D020 I=1,NP
20 B(I) = -(U(I)/DT)*XM(IFP,I)
B(JFP) = B(JFP)-F*Z(IFP)
C
C REMPLISSAGE DE LA DIAGONALE PRINCIPALE DE A.
C
D030 I=1,NP
30 A(I,I) = -(L(I)+V(I))*K(IFP,I)+U(I)/DT
A(1,1) = A(1,1) - W
C
C REMPLISSAGE DE LA DIAGONAL INFERIEURE DE A
C
D040 I=2,NP
40 A(I,I-1)=L(I-1)
NPP=NP-1
C
C REMPLISSAGE DE LA DIAGONALE SUPERIEURE DE A.
C
D050 I=1,NPP
50 A(I,I+1)=V(I+1)*K(IFP,I+1)
C
C APPEL A LA RESOLUTION DU SYSTEME A.X = B
C
CALL RESOLY(A,B,X,NP)
RETURN
END

C SOUS - PROGRAMME R E S O L X

C
SUBROUTINE RESOLX(A,B,X,NP)
DIMENSTON A(20,20),B(20)
DIMENSION X(20)
K=1

C TRIANGULARISATION DE LA MATRICE A

C
DO 10 T=2,NP
A1=A(I,K)
A2=A(I-1,K)
DO 20 J=K,NP
A(I,J)=A(I,J)*A2
20 A(I-1,J)=A(I-1,J)*A1
B(I)=B(I)*A2
B(I-1)=B(I-1)*A1
DO 30 J=K,NP
30 A(I,J)=A(I,J)-A(I-1,J)
B(I)=B(I)-B(I-1)
10 K=K+1

C RESOLUTION DU SYSTEME A.X = B

C
Y(NP)=B(NP)/A(NP,NP).
NPP=NP-1
DO 40 T=1,NPP
K=NP-I
L=K+1
S=0.
DO 50 J=L,NP
50 S=S+A(K,J)*X(J)
40 X(K)=(B(K)-S)/A(K,K)
RETURN
END

C SOUS - PROGRAMME C O N T R O
C CE SOUS - PROGRAMME CONTROLE SI L'ETAT D'EQUILIBRE EST ATTEINT.
C
C SI OUI KK=1
C
C SINON KK=0
C
SUBROUTINE CONTRO(XMN,XM,KK)
DIMENSION XMN(20),XM(3,20)
EPS=0.0005
DO 10 J=1,20
DIF=ABS(XMN(J)-XM(1,J))
IF(DIF.GE.EPS)KK=0
10 CONTINUE
RETURN
END

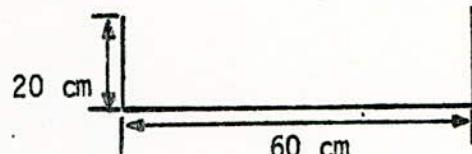
Données pour ordinateur

- Recherche de l'accumulation molaire sur chaque plateau:

Compte tenu des hypothèses suivantes:

- L'accumulation molaire est constante sur les plateaux 2 jusqu'à 19.
- Dans le rebouilleur, elle est 10 fois plus grande.
- Dans le condenseur, elle est 100 fois plus grande.
- Les dimensions d'un plateau sont :

$$\underline{\theta = 60 \text{ cm}}, \quad \underline{h = 20 \text{ cm}}$$



- masse volumique d'un mélange

$$\underline{\text{hydrocarbure} \approx 0,8.}$$

On peut écrire :

Volume d'un plateau :

$$V = S \times h = \pi R^2 \times h = 3,14 \times (0,3)^2 \times 0,2 = \underline{0,056 \text{ m}^3}$$

Masse totale du mélange sur un plateau:

$$M_T = 0,056 \times 0,8 = \underline{0,0448 \text{ Kg}}$$

Masse molaire du mélange :

$$44 \times 0,469 + 58 \times 0,531 = \underline{51,434 \text{ Kg}}$$

(0,469 et 0,531 étant respectivement les concentrations en propane et en butane sur un plateau)

d'où du plateau 2 jusqu'à 19 on a:

$$U = \frac{0,0448}{0,0514} = 0,8715 \text{ moles}$$

Plateau 1 : condenseur : $U_1 = 87,150 \text{ moles}$

Plateau 20: rebouilleur: $U_{20} = 8,715 \text{ moles}$

PRESENTATION
DES RESULTATS

Nous présentons ici un certain nombre de résultats, correspondant à une simulation avec laquelle nous avons testé l'ensemble des programmes écrits.

L'exemple traité ici est celui d'une colonne binaire type "DEPROPANISEUR" (distillant un mélange de deux composants: propane - butane).

- Cette colonne est alimentée au plateau 10.

Le débit d'alimentation est :

43,222 moles/sec.

- Le vecteur de concentration d'alimentation est:

$C_3: 0,3$; $C_4: 0,5$.

- La pression est constante: 17,5 bars.

Les variables indépendantes choisies pour ces simulations sont:

- Le débit de reflux (LR)
- La puissance thermique du rebouilleur (QB).
- Le débit d'alimentation (FL).

Nous avons réalisé sur cet exemple les manipulations suivantes qui correspondent aux figures (5 à 9)

- Initialement

Le débit d'alimentation: $FL = 43,222 \text{ moles/sec.}$

Le débit du reflux : $LR = 235 \text{ moles/sec.}$

La puissance thermique du rebouilleur:

$$\underline{QB = 70 \times 10^4 \text{ cal/sec.}}$$

La colonne atteint son état d'équilibre au bout de:

50 sec. (Fig. 5)

- Puis nous avons fait:

* Diminuer LR de 235 moles/sec à $LR = 205 \text{ moles/sec.}$

l'état d'équilibre est atteint au bout de:

130 sec. (Fig. 6)

* Augmenter LR de 205 moles/sec à $LR = 265 \text{ moles/sec.}$

l'état d'équilibre est atteint au bout de:

70 sec. (Fig. 7)

* Diminuer QB de $70 \times 10^4 \text{ cal/sec.}$ à $QB = 65 \times 10^4 \text{ cal/sec.}$

l'état d'équilibre est atteint au bout de:

60 sec. (Fig. 8)

* Augmenter QB de $65 \times 10^4 \text{ cal/sec.}$ à $QB = 75 \times 10^4 \text{ cal/sec.}$

l'état d'équilibre est atteint au bout de:

60 sec. (Fig. 9)

ACCUMUL. :
 PLATEAU 1 : .871 MOLES-----PLATEAUX 2 A 19 : .871 MOLES-----PLATEAU 20 : .8715 MOLES
 CONCENTRATIONS D'ALIM. :
 C3 : .300 C4 : .500

A .020 ,	B -.760 ,	C .009 ,	D -.080 ,	E 50.000 ,	F -650.000 ,	G 60.000 ,	H 1300.000
DEBIT D'ALIM.	ENTH. D'ALIM.	QB.	REFFLUX	QC			
43.222 MOLES/S	5000.000 CAL/MOLE	700000. CAL./S	235.000 MOLES/S	715035.440 CAL./S			

DT = 10. SECONDES

COLONNE BINAIRES ("DEPROPRANISEUR")

* CONC. C3	* CONC. C4	* CONC. C3	* CONC. C4	* COEF. C3	* COEF. C4	* DEBIT QB.	* DEBITT	* ENTH. VAP.	* ENTH. LIQ.	* VAPEUR	* LIQUIDE	* TEMP. FN
* LIQ.	* VAP.	* LIQ.	* VAP.	* MOLES/S	* MOLES/S	* CAL/MOLE	* CAL/MOLE	* CAL/MOLE	* CAL/MOLE	* DEG.C		
* .999	* .001	* .999	* .001	* 1.000	* .712	* 235.000	* .000	* 3750.715	* 6580.859	* 88.014		
* .993	* .007	* .995	* .005	* 1.002	* .713	* 234.972	* 252.185	* 3755.059	* 6586.070	* 88.101		
* .988	* .012	* .991	* .009	* 1.003	* .714	* 234.491	* 252.158	* 3758.692	* 6590.430	* 88.174		
* .978	* .022	* .984	* .016	* 1.006	* .715	* 233.594	* 251.677	* 3766.031	* 6599.234	* 88.321		
* .959	* .041	* .971	* .029	* 1.012	* .717	* 231.924	* 250.779	* 3780.199	* 6616.238	* 88.604		
* .924	* .076	* .945	* .055	* 1.023	* .722	* 228.710	* 249.110	* 3807.105	* 6648.527	* 89.142		
* .860	* .140	* .898	* .102	* 1.044	* .732	* 223.122	* 245.895	* 3859.207	* 6711.051	* 90.184		
* .753	* .247	* .815	* .185	* 1.082	* .749	* 215.961	* 240.307	* 3955.793	* 6826.953	* 92.116		
* .611	* .389	* .698	* .302	* 1.143	* .776	* 209.908	* 233.147	* 4106.309	* 7007.570	* 95.126		
* .469	* .531	* .570	* .430	* 1.216	* .809	* 243.048	* 227.094	* 4290.035	* 7228.039	* 98.801		
* .376	* .624	* .479	* .521	* 1.274	* .835	* 252.367	* 217.011	* 4434.039	* 7400.848	* 101.681		
* .360	* .640	* .462	* .538	* 1.284	* .840	* 251.172	* 226.331	* 4461.110	* 7433.328	* 102.222		
* .338	* .662	* .439	* .561	* 1.300	* .847	* 249.477	* 225.135	* 4499.547	* 7479.457	* 102.991		
* .308	* .692	* .407	* .593	* 1.322	* .857	* 247.494	* 223.440	* 4554.387	* 7545.266	* 104.088		
* .270	* .730	* .365	* .635	* 1.351	* .870	* 245.495	* 221.457	* 4628.187	* 7633.828	* 105.564		
* .226	* .774	* .314	* .686	* 1.388	* .887	* 243.500	* 219.459	* 4720.359	* 7744.430	* 107.407		
* .178	* .822	* .255	* .745	* 1.432	* .906	* 241.989	* 217.463	* 4830.191	* 7876.230	* 109.604		
* .130	* .870	* .192	* .808	* 1.480	* .928	* 241.481	* 215.953	* 4951.144	* 8021.375	* 112.023		
* .087	* .913	* .133	* .867	* 1.528	* .950	* 236.373	* 215.445	* 5070.394	* 8164.473	* 114.408		
* .030	* .970	* .048	* .952	* 1.599	* .981	* 26.036	* 210.337	* 5247.102	* 8376.520	* 117.942		

FIGURE "4"

ETAT D' EQUILIBRE

A L'INSTANT T + 5 DT.

DEBIT D'ALIM.
43.222
MOLES/SENTH. D'ALIM.
5000.000
CAL/MOLEQR.
700000
CAL./S:REFLUX
235.000
MOLES/S
715144.750
CAL./S

COLONNE RETRAITREE ("DEPRECANTEUR")

	CONC.	CONC.	CONC.	CONC.	COEFF.	COEFF.	DEBTT	DEBTT	ENTH.	ENTH.	TENP.
	LIO.C3	LIC.C4	VAP.C3	VAP.C4	EGU.C4	LIO.	VAP.	LTCGLIDE	VAPFLR	EN	
	*	*	*	*	*	*	*	*	*	*	*
1	.956	.044	.968	.032	1.013	.718	235.000	.000	3782.696	6619.234	88.654
2	.938	.062	.956	.044	1.018	.720	234.260	250.725	3795.840	6635.008	88.917
3	.916	.084	.939	.061	1.025	.723	233.302	249.984	3813.145	6655.774	89.263
4	.888	.112	.919	.081	1.034	.727	232.076	249.026	3835.821	6682.988	89.716
5	.853	.147	.892	.108	1.046	.733	230.529	247.800	3865.352	6718.422	90.307
6	.809	.191	.859	.141	1.061	.740	228.616	246.253	3903.480	6764.176	91.070
7	.757	.243	.818	.182	1.081	.748	226.319	244.341	3952.117	6822.539	92.042
8	.696	.304	.769	.231	1.105	.759	223.665	242.043	4013.106	6895.726	93.262
9	.627	.373	.712	.288	1.135	.773	220.761	239.390	4087.781	6985.336	94.756
10	.553	.447	.648	.352	1.171	.789	253.796	236.495	4176.297	7091.554	96.526
11	.515	.485	.613	.387	1.191	.798	252.254	226.298	4226.512	7151.812	97.530
12	.469	.531	.570	.430	1.216	.809	250.496	224.757	4290.476	7228.574	98.810
13	.416	.584	.519	.481	1.248	.824	248.622	222.999	4370.082	7324.098	100.402
14	.357	.643	.459	.541	1.286	.841	246.821	221.125	4466.086	7439.305	102.322
15	.296	.704	.394	.606	1.331	.861	245.335	219.324	4577.125	7572.551	104.543
16	.236	.764	.325	.675	1.380	.883	244.404	217.838	4698.996	7718.797	106.980
17	.180	.820	.258	.742	1.430	.905	244.162	216.907	4824.672	7869.605	109.493
18	.132	.868	.195	.805	1.472	.927	244.572	216.664	4945.648	8014.777	111.913
19	.093	.907	.141	.859	1.522	.947	245.448	217.075	5054.211	8145.051	114.084
20	.062	.938	.096	.904	1.552	.963	27.497	217.950	5145.375	8254.453	115.908

----- ETAT D'ÉQUILIBRE ----- A L'INSTANT T+13 DT.

DEBIT D'ALIN.
43.222
MOLES/S

ENTH. D'ALIN.
5000,000
CAL/SECLE

REFLUX
205.000
MOLES/S

QC
718999-090
CAL. 7S

COLONNE RITRAITE ("DEPRCRAFTSEL")

ETAT D' EQUILIBRE

A L'INSTANT T = 7 DT.

DEBIT D'ALTM.
43.222
MOLES/SENTH. D'ALTM.
5000.000
CAL/MOLEQF.
700000
CAL./S.REFLUX
265.000
MOLES/SQC
728206.460
CAL./S.

COLONNE RÉTROGRESSION ("DEPROPRANTSFLR")

	DEBIT	DEPTT	ENTH.	ENTH.	TEMP.
	LTS	VAP	LIGUIDÉ	VAPEUR	FA
	MOLES/S	MOLES/S	CAL/MOLE	CAL/MOLE	DEG.C
*	*	*	*	*	*
*	.990	.010	.993	.007	1.003
*	.985	.015	.990	.010	1.004
*	.979	.021	.985	.015	1.006
*	.971	.029	.979	.021	1.009
*	.958	.042	.970	.030	1.012
*	.940	.060	.957	.043	1.018
*	.914	.086	.938	.062	1.026
*	.879	.121	.912	.088	1.037
*	.829	.171	.874	.126	1.054
*	.763	.237	.823	.177	1.078
*	.761	.239	.821	.179	1.079
*	.757	.243	.818	.182	1.081
*	.751	.249	.813	.187	1.083
*	.742	.258	.806	.194	1.087
*	.729	.271	.796	.204	1.092
*	.709	.291	.780	.220	1.100
*	.679	.321	.756	.244	1.112
*	.637	.363	.720	.280	1.131
*	.576	.424	.668	.332	1.159
*	.495	.505	.594	.406	1.202

ETAT D'ÉQUILIBRE ----- A L'INSTANT T+ 6 DT.

DEBIT D'ALIM.
43.222
MOLES/S

ENTH. D'ALIM.
5000.000
CAL/MOLE

QD.
650000.
CAL./S.

REFFLUX
265.000
MOLES/S
OC
CAL./S.

COLONNE BTNATRE ("DEPROGANISEUR")

	CONC. *	CONC. *	CONC. *	COEFF. *	COEFF. *	DEBIT	ENTH. *	ENTH. *	TEMP. *
	LIQ. C3	Liq. C4	VAP. C3	VAP. C4	ERU. C3	ERU. C4	VAP.	LIGUIDE	VAPEUR
	*	*	*	*	*	*	MOLES/S	MOLES/S	CAL/MOLE
	.994	* .006	* .996	* .004	* 1.002	* .713	* 265.000	* .000	* 3754.156
	.992	* .008	* .994	* .006	* 1.002	* .713	* 264.891	* 240.377	* 3755.840
	.988	* .012	* .992	* .008	* 1.003	* .714	* 264.722	* 240.268	* 3758.457
	.983	* .017	* .988	* .012	* 1.005	* .714	* 264.458	* 240.100	* 3762.524
	.974	* .026	* .982	* .018	* 1.008	* .715	* 264.046	* 239.836	* 3768.860
	.961	* .039	* .972	* .028	* 1.012	* .717	* 263.405	* 239.424	* 3778.754
	.941	* .059	* .957	* .043	* 1.018	* .720	* 262.406	* 238.784	* 3794.207
	.910	* .090	* .935	* .065	* 1.027	* .724	* 260.853	* 237.784	* 3818.414
	.863	* .137	* .900	* .100	* 1.043	* .731	* 258.453	* 236.232	* 3856.394
	.795	* .205	* .848	* .152	* 1.066	* .742	* 290.638	* 233.832	* 3916.090
	.795	* .205	* .848	* .152	* 1.067	* .742	* 290.600	* 222.795	* 3916.765
	.793	* .207	* .847	* .153	* 1.067	* .742	* 290.536	* 222.757	* 3917.914
	.791	* .209	* .845	* .155	* 1.068	* .743	* 290.430	* 222.693	* 3919.840
	.788	* .212	* .842	* .158	* 1.069	* .743	* 290.254	* 222.587	* 3923.074
	.782	* .218	* .838	* .162	* 1.071	* .744	* 289.960	* 222.412	* 3928.481
	.772	* .228	* .830	* .170	* 1.075	* .746	* 289.471	* 222.118	* 3937.523
	.756	* .244	* .818	* .182	* 1.081	* .748	* 288.659	* 221.629	* 3952.656
	.730	* .270	* .797	* .203	* 1.091	* .753	* 287.314	* 220.817	* 3977.981
	.689	* .311	* .763	* .237	* 1.108	* .761	* 285.109	* 219.472	* 4020.422
	.624	* .376	* .709	* .291	* 1.137	* .773	* 67.845	* 217.265	* 4091.613

ETAT D'ÉQUILIBRE A L'INSTANT $t + \delta t$.

DEBIT D'ALIM.
43.222
MOLES/S

ENTH. D"ALT".
5000.000
CAL/MOLE

GB
750000.
CAL./S.

REFLUX
265.000
MOLES/S

QC
772737-390
CAL. 15

COLONNE RETRAITÉE ("DEPRECATED")

INTERPRETATION DES RESULTATS

Ici la comparaison se fait entre les états d'équilibre obtenus :

Entre l'état (m) et ($n-1$), puis entre ($n+1$) et n , etc...

1. Le reflux diminue de $LR = 235 \text{ moles/sec. à } LR = 205 \text{ moles/sec.}$

- Pour $LR = 235 \text{ moles/sec.}$ on a:

Concentration de tête en propane: 0,956 $\rightarrow T \text{ en } ^\circ C = 88,654$

Concentration de pied en propane: 0,062 $\rightarrow T \text{ en } ^\circ C = 115,908$

- Pour $LR = 205 \text{ moles/sec.}$ on a:

Concentration de tête en propane: 0,564 $\rightarrow T \text{ en } ^\circ C = 96,270$

Concentration de pied en propane: 0,002 $\rightarrow T \text{ en } ^\circ C = 119,864$

On constate que la concentration de tête en propane a diminué et celle de pied aussi, par contre les températures ont augmenté.

Cela est normal car le reflux est un liquide à basse température qui lors de son contact avec les vapeurs qui montent, est partiellement réchauffé, vaporisé et enrichi de composant à haute température d'ébullition (propane); Et les vapeurs qui montent sont partiellement refroidies, se condensent et s'enrichissent de composant à basse température d'ébullition (butane).

(Lois des équilibres liquide-vapeur)

2. Le reflux augmente de $LR = 205 \text{ moles/sec. à } LR = 265 \text{ moles/sec. :}$

Compte tenu de la conclusion précédente:

Le phénomène inverse se passe (voir fig. 6 et 7)

3. La chauffe diminue de $QB = 7 \cdot 10^5$ cal/sec. à $QB = 65 \cdot 10^4$ cal/sec.

Pour $QB = 7 \cdot 10^5$ cal/sec. on a :

Concentration de tête en propane : 0,990 → T en °C = 88,151

Concentration de pied en propane : 0,495 → T en °C = 98,076

Pour $QB = 65 \cdot 10^4$ cal/sec. on a:

Concentration de tête en propane : 0,994 → T en °C = 88,083

Concentration de pied en propane : 0,624 → T en °C = 94,832

On constate que la concentration de tête en propane a augmenté et celle de pied aussi par contre les températures ont diminué.

Cela paraît évident car la diminution de la chauffe entraîne obligatoirement la diminution de la température sur chaque niveau de la colonne d'où condensation des vapeurs qui montent, (même conclusion que dans le cas du reflux qui augmente).

4. La chauffe augmente de $QB = 65 \cdot 10^4$ cal/sec. à $75 \cdot 10^4$ cal/sec.

Compte tenu de la conclusion précédente:

Le phénomène inverse se passe (voir fig. 8 et 9).

- CONCLUSION -

Le travail que nous avons élaboré n'est pas une fin en soi, en ce sens qu'il ne constitue que la partie modélisation et simulation.

La prochaine étape serait de réaliser la commande comme nous l'avons souligné dans l'introduction.

Nous souhaitons que cette étude faite servira de base pour orienter ceux qui aimeraient concevoir la commande.

Nous tenons à souligner que beaucoup de difficultés ont été rencontrées pour la réalisation de ce travail parmi lesquelles nous citons:

- La programmation (manque de bases au début).
- Manque de perforatrice.
- Ordinateur non disponible pour la compilation et le passage des programmes.

- B I B L I O G R A P H I E -

- J.P. GAUTHIER - Janvier 1978

Thèse de Docteur - Ingénieur , E.N.S.I.M.A.G.

"Outils pour la conception de simulateurs d'entraînement aux procédés industriels".

- J. VIGNES et M. LA PORTE - 1972

"Théorie et pratique de la programmation Fortran".

- P. WUITHIER , TOME I - 1972

"Le pétrole , raffinage et Génie Chimique".

- I. GOUREVITCH

Editions : MOSCOU

" Raffinage du pétrole, propriétés générales et distillation primaire des pétroles".