

École polytechnique de Louvain

Modélisation et contrôle d'une colonne de distillation

Auteur: **Antoine TUERLINCKX**
Promoteur: **Denis DOCHAIN**
Lecteurs: **François WIELANT, Denis MIGNON**
Année académique 2021–2022
Master [120] : ingénieur civil en mathématiques appliquées

Abstarct

The distillation is a very ancient process which consists to separate the components from a liquid mixture by using their difference of volatility. This thesis begins by presentation of the different technical aspects necessary for the installation of a distillation column and the second part deals with the modelling, the control and the analysis of a laboratory column that separates methanol from water. Firstly, the simulation is done with Aspen software which only gives the equilibrium state. After that, two models are developed to obtain the dynamical system of the column. A PI controller with anti-windup is implemented for the second model to control the concentration of methanol at the output of the system. An analysis of the stability, controllability and observability is done based on the linearized system. Finally, several improvements are proposed.

Keywords : Distillation, Modelling, Control, Simulation

Table des matières

1	Introduction	3
2	Colonne de laboratoire	4
2.1	Principe de fonctionnement	4
2.2	Colonne Armfield	10
2.2.1	Spécifications	11
2.2.2	Sécurité	13
2.3	Mélange à distiller	14
2.4	Condenseur	14
2.5	Commande et contrôle de la colonne	16
3	Modélisation et contrôle de la colonne de distillation	18
3.1	Aspen	18
3.1.1	Résultats	19
3.1.2	Avantages et inconvénients	20
3.2	Premier modèle	21
3.2.1	Equations	21
3.2.2	Résultats	25
3.3	Deuxième modèle	28
3.3.1	Equations	29
3.3.2	Résultats	34
3.3.3	Contrôle du système	36
3.3.4	Analyse du système	40
3.3.5	Améliorations	47
4	Conclusion	49

Chapitre 1

Introduction

Ce travail de fin d'études traite des différents aspects d'une colonne de distillation de laboratoire dans le but d'en installer une dans le département des mathématiques appliquées de l'École polytechnique de Louvain. Dans un premier temps, nous nous intéresserons aux principes de fonctionnement d'une colonne de distillation. Nous présenterons ensuite le choix de la colonne ainsi que ses spécifications afin de respecter au mieux les contraintes nécessaires à l'installation d'une colonne de laboratoire à l'UCLouvain. En effet, pour ce genre d'équipement, il est crucial d'étudier les normes de sécurité ainsi que les conditions requises au bon fonctionnement de la colonne comme par exemple la quantité d'eau nécessaire pour le refroidissement.

La deuxième partie de ce travail traitera de la simulation et la modélisation d'une colonne de laboratoire. Tout d'abord, en utilisant un logiciel déjà existant comme Aspen afin d'avoir un premier aperçu des résultats à l'état stationnaire. Ensuite, nous étudierons les équations qui modélisent une colonne de distillation dans le but d'implémenter le système dynamique sur Matlab. Sur base de ce modèle, nous nous pencherons sur l'analyse et le contrôle du système. Finalement, nous aborderons les différents points d'amélioration à apporter au modèle.

Chapitre 2

Colonne de laboratoire

2.1 Principe de fonctionnement

La colonne de distillation permet de séparer les différents constituants d'un mélange homogène dont les températures d'ébullition sont différentes. En effet, ce procédé se base sur la différence de volatilité entre les constituants. La volatilité représente la facilité avec laquelle une substance se vaporise. Ainsi en chauffant le mélange, l'élément le plus volatil, appelé distillat, se vaporise et monte en haut de la colonne, tandis que les autres constituants auront tendance à rester à l'état liquide et finissent donc par descendre vers le bas de la colonne par gravité. Le distillat est ensuite refroidi à l'aide d'un condenseur afin de le récupérer à l'état liquide.

Ce procédé de séparation est une technique très ancienne. Sa première apparition remonterait au I^{er} siècle av. J.-C. en Grèce afin d'obtenir des boissons alcoolisées. Les méthodes de distillations se sont ensuite développées et améliorées partout à travers le monde et au fil des époques. On voit ainsi apparaître les premiers alambics avec une cornue (voir figure 2.1) durant le IX^e siècle afin d'améliorer la condensation du distillat [1]. Aujourd'hui, la distillation joue également un rôle très important dans le raffinage du pétrole. En effet, à l'aide de colonnes de distillation industrielles (voir figure 2.2), les compagnies pétrolières extraient les différents constituants du pétrole brut (voir figure 2.3) : butane, propane, essence légère (naphta), kérosène, diesel, ... Cependant, la distillation reste un procédé très énergivore et qui peut s'avérer parfois complexe. C'est la raison pour laquelle il est important de bien comprendre son fonctionnement et de savoir le modéliser afin de mieux le contrôler.

Il existe deux types de distillation : la distillation continue et la distillation discontinue (*batch distillation*). Lors d'une distillation continue, le mélange à séparer est continuellement introduit dans la colonne. Ce qui signifie donc que si les

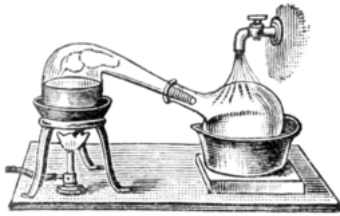


FIGURE 2.1 – Alambic avec une cornue



FIGURE 2.2 – Colonnes de distillation industrielles

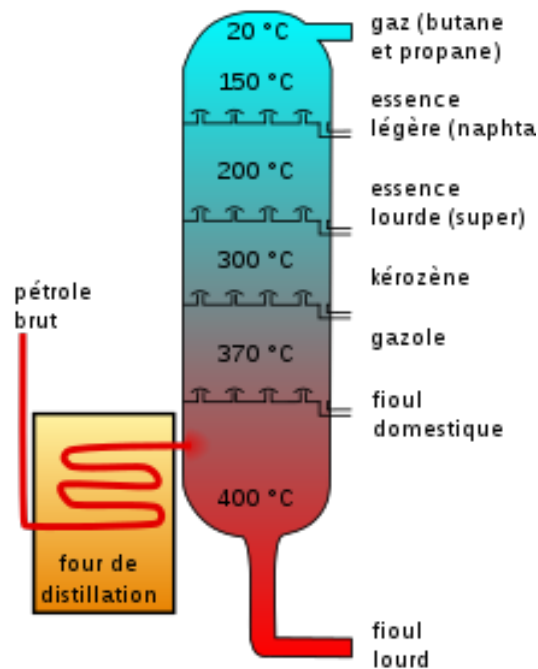


FIGURE 2.3 – Raffinage du pétrole

paramètres d'entrée (composition du mélange à l'entrée, puissance du boiler pour chauffer la colonne, le ratio de reflux,...) sont inchangés, le profil de température et la composition du mélange au sein de la colonne seront constants. Tandis que pour une distillation discontinue, le mélange à séparer est introduit une seule fois dans la colonne. Ce qui induit donc que le profil de température et la composition du

mélange au sein de la colonne va continuellement varier jusqu'à ce qu'on ait fini de distiller la quantité introduite initialement. Afin de faciliter le contrôle du système, nous avons décidé pour la suite de ce mémoire, de travailler avec une distillation en continue.

En vue d'améliorer les performances d'une colonne de distillation, il est important d'avoir une grande surface de contact entre la phase gazeuse et la phase liquide. Il existe principalement deux types colonnes qui permettent d'augmenter cette surface de contact : la colonne à plateaux et la colonne à garnissage.

Les colonnes à plateaux sont constituées d'un certain nombre de plaques perforées appelées plateaux (voir figure 2.4). En s'écoulant vers le bas, le liquide va être retenu par un barrage au niveau du plateau avant de descendre au plateau inférieur via un déversoir (voir figure 2.5). Tandis que la vapeur va monter et traverser le plateau au niveau des perforations ce qui force donc la phase liquide et la phase gazeuse à rentrer en contact. Il existe trois types de plateaux : les plateaux à calottes, les plateaux à soupapes et les plateaux perforés.

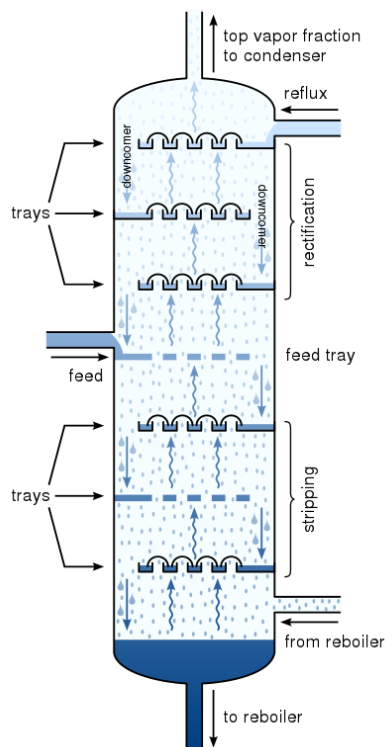


FIGURE 2.4 – Colonne à plateaux

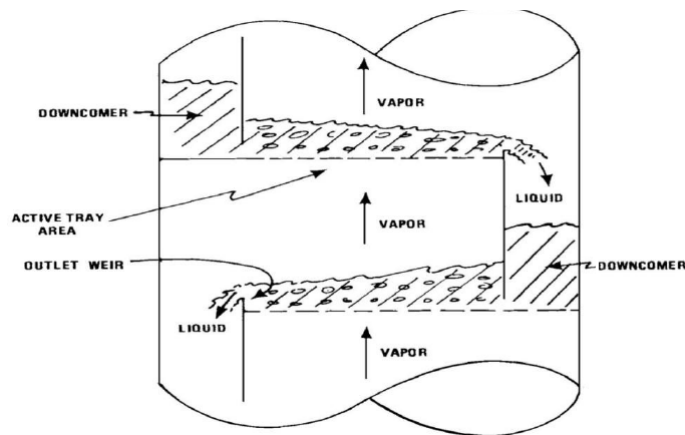


FIGURE 2.5 – Schéma d'un plateau

La figure 2.6 représente un plateau à calottes. On constate avec ce type de plateau que la vapeur est coincée au niveau de la calotte. Afin de monter vers le plateau supérieur, la vapeur s'échappe de la calotte grâce à des perforations latérales en formant des bulles dans le liquide, obligeant ainsi le gaz à rentrer en contact avec la phase liquide.

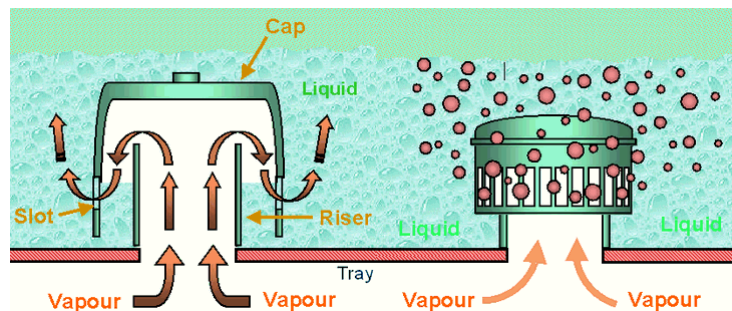


FIGURE 2.6 – Plateau à calottes

La figure 2.7 représente un plateau à soupapes. Ces dernières vont s'ouvrir en fonction de la pression de la vapeur et permettre ainsi au gaz de rentrer en contact avec le liquide. Plus la pression est élevée, plus la soupape s'ouvrira.

Le plateau perforé est le type de plateau le plus simple. En effet, comme on peut le constater sur la figure 2.8, il s'agit simplement d'une plaque perforée de trous qui a donc l'avantage d'être le moins cher parmi les trois types de plateaux. On peut également voir sur le devant du plateau, le barrage ainsi que le déversoir qui permet de guider le liquide vers le plateau inférieur.

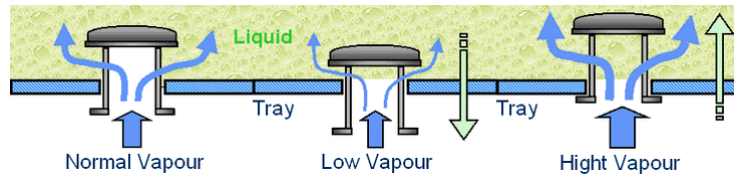


FIGURE 2.7 – Plateau à soupapes



FIGURE 2.8 – Plateau perforé

Le nombre de plateaux nécessaires pour la distillation va dépendre des composants du mélange à séparer et de la pureté souhaitée du distillat en sortie de la colonne. En effet, au plus la volatilité relative est élevée, au moins il y aura besoin de plateaux. Et au contraire, au plus on souhaite un distillat pur, au plus on aura besoin de plateaux. Il existe cependant certains mélanges qui sont "impossibles" à séparer par cette méthode de distillation. C'est notamment le cas pour les mélanges azéotropes. Un mélange azéotrope est un mélange liquide qui bout à température fixe en gardant une composition fixe [2]. C'est à dire qu'il existe une certaine composition pour laquelle le mélange va se comporter comme une espèce chimique pure. Mis à part ces cas particuliers, le nombre de plateaux théoriques afin de séparer un mélange binaire peut être calculer à l'aide du diagramme de McCabe-Thiele.

Le deuxième type de colonne est la colonne à garnissage. Il s'agit de colonnes

qui sont remplies à l'aide d'un matériau ce qui permet donc d'augmenter la surface de contact entre la vapeur et le liquide dans la colonne de distillation. Ce type de colonne peut être utilisé dans le cas où le nombre de plateaux théoriques est trop élevé. Il faut cependant que le remplissage de la colonne ne soit pas trop dense afin de freiner au minimum les flux de vapeur et de liquide. Il existe deux types de garnissage : le garnissage en vrac et le garnissage structuré. Pour le garnissage en vrac, la colonne est remplie de petits éléments qui peuvent être en divers matériaux (céramique, métal, plastique,...). Les éléments les plus utilisés pour remplir la colonne sont les anneaux de Raschig et les anneaux de Pall illustrés respectivement sur les figures 2.9 et 2.10. Tandis que pour un garnissage structuré, la colonne est remplie avec une structure telle qu'illustrée par la figure 2.11.

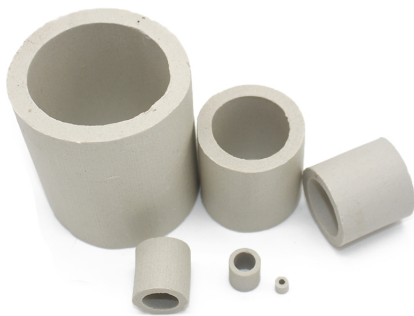


FIGURE 2.9 – Anneaux de Raschig



FIGURE 2.10 – Anneaux de Pall



FIGURE 2.11 – Garnissage structuré

2.2 Colonne Armfield

Comme expliqué précédemment, le choix de la colonne dépend du type de distillation et du mélange que l'on souhaite séparer. Dans le cas qui nous occupe, l'objectif étant de pouvoir installer une colonne de laboratoire, les contraintes principales sont la taille de la colonne ainsi que le budget. En effet, il faut que la colonne puisse être installée dans un local du bâtiment Euler, il est donc nécessaire de vérifier que les conditions requises soient bien satisfaites (exemples : débit d'eau du condenseur, taille de la colonne, puissance électrique,...). Il est également important de vérifier que les normes de sécurité soient compatibles avec celles de l'université. De plus, il faut prendre en compte le fait que cette colonne puisse être manipulée sans trop de difficulté par des étudiants ou des chercheurs.

Des articles avec un objectif similaire i.e. contrôler une colonne de laboratoire, ont été publiés par des chercheurs de l'université de Bratislava [3],[4],[5]. Pour leurs expériences, ils utilisent la colonne UOP3CC produite par Armfield [6] visible sur la figure 2.12. Cette colonne répond aux critères que nous recherchons. Malheureusement, pour des raisons de budget et également de délai de livraison, nous n'avons pas pu commander la colonne. Nous avons donc décidé de la modéliser et la simuler numériquement. Pour la suite de ce travail, le dimensionnement et les spécifications du modèle numérique se basent sur la colonne UOP3CC de Armfield.



FIGURE 2.12 – Colonne de distillation UOP3CC de Armfield

2.2.1 Spécifications

La colonne UOP3CC de Armfield est une colonne de distillation de laboratoire fournie avec un panneau de commande (voir figure 2.13) et qui peut être contrôlée par ordinateur. La colonne peut être utilisée pour faire de la distillation continue ou discontinue. La colonne mesure 50 mm de diamètre et est constituée de 9 plateaux perforés (voir figure 2.14). Un thermocouple est installé sur chacun des plateaux afin de prélever la température. Il est également possible de prélever un échantillon à chaque étage de la colonne afin de mesurer la composition du mélange. Pour diminuer les pertes de chaleur, la colonne est isolée thermiquement. De plus, la colonne dispose d'un manomètre permettant de mesurer la différence de pression entre le haut et le bas de la colonne. L'ensemble mesure 2,25m de haut, 0,85m de long et pèse environ 450kg. L'installation nécessite une alimentation électrique 230V monophasé d'une fréquence de 50Hz pour un courant de 13A.



FIGURE 2.13 – Panneau de commande

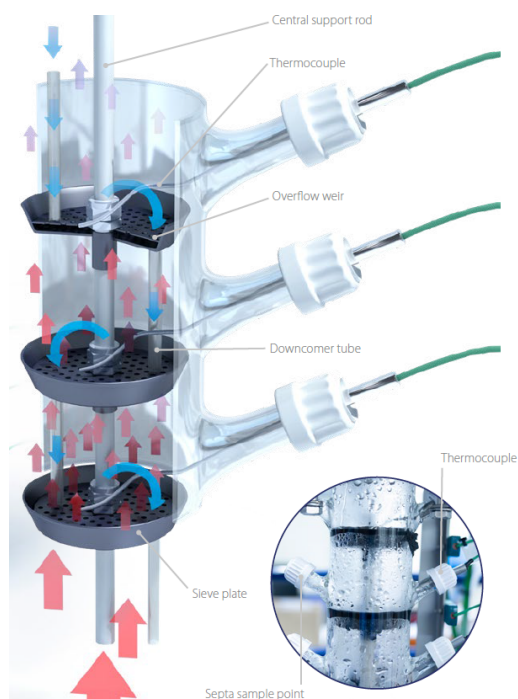


FIGURE 2.14 – Plateaux perforés - UOP3CC Armfield

Le schéma de la colonne de laboratoire est visible sur la figure 2.15. Le mélange à séparer entre dans la colonne au niveau du plateau n°5 qui est appelé plateau d'alimentation. Le débit du flux d'entrée est contrôlé par une pompe pouvant aller de 0 à 250ml/min. La partie de la colonne située en dessous du plateau

d'alimentation est appelée section d'épuisement, tandis que celle qui est située au dessus est appelée section de rectification. L'ensemble de la colonne est chauffé par un boiler situé en bas, ayant une puissance maximum de 2,5kW et une capacité de 20 litres. Le liquide, principalement composé de résidus, descend le long de la colonne et arrive au niveau du boiler pour être chauffé. Une partie de ce mélange va se vaporiser et remonter dans la colonne, tandis que le surplus qui quitte le boiler va servir à préchauffer le mélange qui rentre dans la colonne grâce à un échangeur de chaleur. Les vapeurs vont ensuite monter et passer à travers les plateaux perforés. Une fois arrivé en haut de la colonne, la vapeur enrichie en distillat, est refroidie au moyen d'un condenseur. Le condenseur est alimenté avec de l'eau froide ayant un débit de 15 l/min à une pression de 2 bar. Le distillat condensé est ensuite dirigé vers la valve de reflux. Il s'agit en fait d'une vanne 3 voies qui permet de renvoyer une partie du distillat dans le haut de la colonne et d'extraire le reste hors de la colonne. Cette vanne est contrôlée électriquement et est caractérisée par le ratio de reflux R défini par

$$R = \frac{L}{D} \quad (2.1)$$

où

- L représente le flux qui retourne dans le haut de la colonne [mol/s]
- D représente le flux qui sort de la colonne [mol/s]

Le ratio de reflux R est très important car il permet de contrôler la concentration de distillat en sortie de la colonne. En effet, en général au plus R est élevé, au plus la concentration en distillat va augmenter en sortie. Cependant en augmentant le flux L , on diminue le flux D ce qui veut donc dire que le débit de distillat extrait va diminuer. Il faut donc trouver un compromis entre d'un côté la pureté du distillat et de l'autre la quantité extraite.

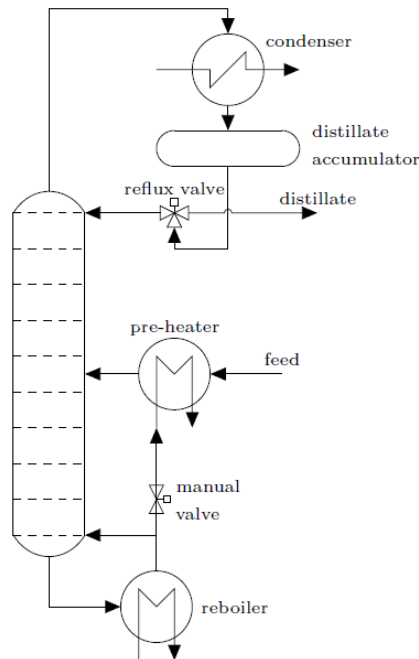


FIGURE 2.15 – Schéma colonne UOP3CC de Armfield [3]

2.2.2 Sécurité

La sécurité est un aspect très important dans l'installation d'une colonne de distillation. Les principaux éléments pour lesquels il faut être attentif sont les risques d'explosions, les risques de feu, les protections électriques, les risques chimiques.

Etant donné que l'on chauffe des gaz qui peuvent s'enflammer, le risque d'explosions est non-négligeable. C'est la raison pour laquelle il est nécessaire de classer en plusieurs zones ATEX les emplacements où des atmosphères explosives peuvent se présenter [7]. La colonne de distillation est classifiée en zone ATEX 1, c'est-à-dire qu'une atmosphère explosive est susceptible d'apparaître de temps en temps dans les conditions normales de fonctionnement. La zone dans un rayon de 2 mètres autour de la colonne est classifié en zone ATEX 2, c'est-à-dire qu'une atmosphère explosive est susceptible d'apparaître rarement ou pendant de courtes périodes. Dans cette zone il est interdit d'utiliser un équipement électrique sans protection contre le feu [8]. De plus, toutes les substances inflammables doivent être stockées en dehors de ces 2 zones.

L'installation électrique de la colonne est équipée d'un disjoncteur différentiel qui coupe l'alimentation électrique en cas de court-circuits, de surcharges ou de

perte à la terre. Ce dispositif protège le matériel des surcharges et l'utilisateur des courants de fuite qui pourraient traverser le corps en cas de dysfonctionnement.

Certains produits chimiques utilisés pour la distillation sont toxiques et peuvent causer des problèmes de santé si ils sont inhalés. C'est notamment le cas pour les vapeurs de méthanol qui peuvent entraîner des problèmes de cécité et de difficulté respiratoire, voire même être mortel si la dose ingérée est supérieure à 100-125 ml. Il est donc fortement recommandé de bien aérer la pièce et d'installer la colonne de distillation dans une pièce munie d'une hotte. De plus, Armfield fournit une liste des produits chimiques qui sont recommandés pour la distillation ainsi que les concentrations avec lesquelles travailler.

2.3 Mélange à distiller

Nous avons choisi de distiller un mélange binaire composé d'eau et de méthanol. Ce mélange a l'avantage d'être facile à séparer car sa volatilité relative est comprise entre 2,4 et 7,8. La température d'ébullition du méthanol est de 64,5°C, tandis que celle de l'eau est à 100°C. Cela signifie donc que la température de la colonne sera comprise entre 100 et 64,5°C. Etant donné que le méthanol est plus volatil que l'eau, le méthanol sera le distillat et l'eau sera le résidu.

Le nombre de plateaux minimum pour distiller un mélange eau-méthanol est de 6, tandis que le nombre de plateaux théoriques calculé à l'aide du diagramme de McCabe-Thiele est de 12. Pour rappel, la colonne UOP3CC de Armfield possède 9 plateaux ce qui est donc suffisant pour pouvoir distiller ce mélange.

L'autre avantage du mélange eau-méthanol est qu'il s'agit du mélange utilisé par les chercheurs de l'université de Bratislava [3],[4],[5]. Cela nous permet donc de comparer leurs données expérimentales avec nos résultats.

2.4 Condenseur

Afin de condenser les vapeurs de méthanol qui arrivent en haut de la colonne, on refroidit le gaz à l'aide d'un condenseur. Un condenseur est un échangeur de chaleur dans lequel circule dans un serpentín un liquide réfrigérant afin de refroidir le gaz et le condenser. Une partie de la chaleur du gaz est ainsi transmise par conduction au liquide réfrigérant qui va donc s'échauffer. Dans le cas de la colonne de Armfield, le liquide réfrigérant est de l'eau provenant du robinet. Le débit d'eau recommandé

pour le condenseur est de 15 L/min à une pression de 2 bar. Le problème est qu'on utilise une grande quantité d'eau ($0,9 \text{ m}^3/h$) qui sert uniquement à refroidir le méthanol et est ensuite évacuée dans les égouts.

Dans un soucis à la fois économique et écologique, pour éviter de gaspiller inutilement de l'eau potable, nous avons pensé à remplacer l'eau du robinet par un grand réservoir d'eau qui circulerait en boucle fermée dans le condenseur. Mais comme expliqué précédemment, l'eau se réchauffe à chaque passage dans le condenseur ce qui fait donc augmenter la température du réservoir. Dans le cas d'une colonne de laboratoire, ça ne pose pas vraiment de problème car la colonne ne fonctionne pas en permanence 24h/24 comme cela peut être le cas pour des colonnes industrielles. L'eau du réservoir a ainsi le temps de se refroidir entre deux expériences. Il faut donc dimensionner la taille du réservoir afin que celui-ci ne chauffe pas trop rapidement.

Dans un premier temps, on peut calculer le flux de chaleur Φ transféré par le méthanol dans le condenseur en utilisant la formule :

$$\Phi = hA(T_2 - T_1) \quad (2.2)$$

avec

- Φ : la chaleur transférée par unité de temps [W]
- h : le coefficient de convection thermique [$W/(m^2K)$]
- A : la surface de contact par laquelle le transfert de chaleur se fait [m^2]
- T_1 : la température de l'eau en entrant dans le condenseur [K]
- T_2 : la température du méthanol en entrant dans le condenseur [K]

Pour qu'une colonne de distillation soit efficace, il faut que la température en haut de la colonne soit le plus proche possible de la température d'ébullition du distillat. Dans le cas du méthanol, la température d'ébullition est de 65°C , on peut donc prendre T_2 légèrement supérieur à cette valeur. La température de l'eau T_1 correspond à la température de la pièce qui est d'environ 20°C . Cependant, en ce qui concerne le coefficient de convection h et la surface de contact A , aucune donnée n'est fournie par Armfield sur le condenseur. Il est donc très compliqué de calculer Φ sur base de la formule (2.2).

Néanmoins, on peut tout de même borner la valeur de Φ grâce à la puissance du boiler qui est connue. En effet, la chaleur transférée à l'eau par le méthanol dans le condenseur doit être inférieure à l'énergie fournie par le boiler pour chauffer la colonne grâce au principe de conservation d'énergie : $\Rightarrow P_b \geq \Phi$

En faisant l'hypothèse que le réservoir d'eau est parfaitement mélangé et que donc la température y est uniforme, on peut calculer la variation de la température de l'eau du réservoir grâce à la formule :

$$Q = mc\Delta T \quad \Longleftrightarrow \quad \frac{Q}{mc} = \Delta T \quad (2.3)$$

$$\frac{d\Delta T}{dt} = \frac{1}{mc} \frac{dQ}{dt} = \frac{\Phi}{mc} \quad (2.4)$$

$$\leq \frac{P_b}{mc} \quad (2.5)$$

avec

- Q : la chaleur transférée dans le condenseur [J]
- m : la masse d'eau dans le réservoir [kg]
- $c = 4186$: la chaleur spécifique de l'eau [$J/(kg K)$]
- ΔT : la variation de température [K]
- $P_b = 2500$: la puissance du boiler [W]

Si l'on prend par exemple un réservoir de $0,5m^3$ pour alimenter le condenseur, la température de l'eau va augmenter au maximum de $4,3^\circ C/h$. Cette valeur semble suffisamment raisonnable dans le cadre de l'utilisation d'une colonne de laboratoire qui n'est pas utilisée en permanence.

2.5 Commande et contrôle de la colonne

Le contrôle d'une colonne de distillation est l'un des enjeux majeurs pour les industries d'aujourd'hui. L'objectif est de pouvoir contrôler la concentration en distillat en sortie de colonne tout en respectant des contraintes économiques, énergétiques et écologiques. En effet, le processus de distillation est un processus qui consomme beaucoup d'énergie. Ces contraintes supplémentaires complexifient énormément le contrôle du système.

Les principaux paramètres que l'on peut faire varier et qui permettent de contrôler la colonne sont le ratio de reflux et la puissance du boiler. D'un point de vue mathématique, la concentration du flux d'entrée pourrait également être considéré comme un paramètre de contrôle. Cependant, dans les industries, la concentration de ce flux ne peut pas toujours être choisie et est au contraire plutôt considéré comme une perturbation du système.

Les ingénieurs et les mathématiciens ont développé de nombreuses lois de commande afin de contrôler le processus de distillation tout en satisfaisant au mieux

les contraintes énoncées précédemment. Le livre de L. Luyben et Yu [9] s'intéresse à l'aspect économique via le prisme du coût énergétique pour les distillations réactives¹. Ils étudient également l'influence de nombreux paramètres sur le système comme par exemple, le nombre de plateaux, la volatilité des composés, le *molar holdup*, la pression au sein de la colonne, le positionnement du flux d'entrée. Ils s'intéressent aussi à des contrôleurs proportionnel-intégral (PI) pour lesquels ils font varier la structure de la colonne.

L'article de A. Taqvi [10] traite de l'optimisation et du contrôle d'une colonne dans le but de minimiser l'énergie du système à l'aide de Aspen Dynamics. Tout comme dans le livre de L. Luyben et Yu, il analyse l'influence du positionnement du flux d'entrée, du nombre de plateaux et du ratio de reflux en utilisant un contrôleur PI.

Dans l'article [11], l'auteur modélise une colonne de distillation pour le raffinage du pétrole. Afin de contrôler le système, il utilise un MRAC (*model-reference adaptive control*) couplé à un PID (proportionnel-intégral-dérivé). Ce type de contrôleur est utilisé pour des systèmes dont les paramètres peuvent varier au cours du temps et permet ainsi au contrôleur de s'adapter au système. Les contrôleurs adaptatifs sont très souvent utilisés pour la distillation du pétrole car ce genre de systèmes sont non-linéaires, or les contrôleurs sont *designés* sur base du système linéarisé.

La commande prédictive, appelé MPC en anglais (*Model Predictive Control*), est un autre type de contrôleur plus avancé qui est souvent utilisé pour la distillation. Le principe est d'utiliser un modèle du système pour prédire le comportement du vrai système et ainsi trouver la commande optimale pour le contrôler. Il s'agit du type de contrôleur utilisé par les chercheurs de l'université de Bratislava [3],[4],[5]. Dans leurs articles, les auteurs modélisent leur système en utilisant des techniques d'identification du système sur base d'expériences faites sur la colonne UOP3CC de Armfield.

Comme on peut le constater, il existe une large variété de contrôleurs qui sont employés dans le domaine de la distillation. Le sujet du contrôle est abordé plus en profondeur dans la section 3.3.3.

1. Une distillation réactive consiste en la séparation d'un mélange par distillation dans laquelle se produit également une ou plusieurs réactions chimiques.

Chapitre 3

Modélisation et contrôle de la colonne de distillation

Après avoir sélectionné le type de colonne ainsi que le mélange à distiller, nous allons traiter dans cette partie de la modélisation du système. Dans un premier temps, nous utiliserons le logiciel Aspen pour simuler la colonne UOP3CC de Armfield. Nous développerons ensuite deux modèles différents et simulerons le système dynamique sur Matlab. Nous nous intéresserons ensuite au contrôle et à l'analyse du système. Et pour finir, on abordera les différentes améliorations à apporter au modèle.

3.1 Aspen

Aspen est un logiciel qui permet de simuler toutes sortes de procédés chimiques : réacteur, colonne de distillation, échangeur de chaleur, séparateur,... Il est utilisé par exemple, pour simuler l'entièreté d'une installation industrielle. Et dans le cas qui nous intéresse, il permet entre autre de simuler des colonnes de distillation.

Aspen fonctionne par schéma-bloc, c'est à dire qu'il existe déjà de nombreux modèles très complets qui sont implémentés sous forme de blocs et qu'il suffit ensuite de connecter entre eux. Le schéma-bloc de la colonne est visible sur la figure 3.1. Une des parties les plus importante lorsqu'on utilise ce logiciel est le choix du modèle thermodynamique et la paramétrisation des modèles.

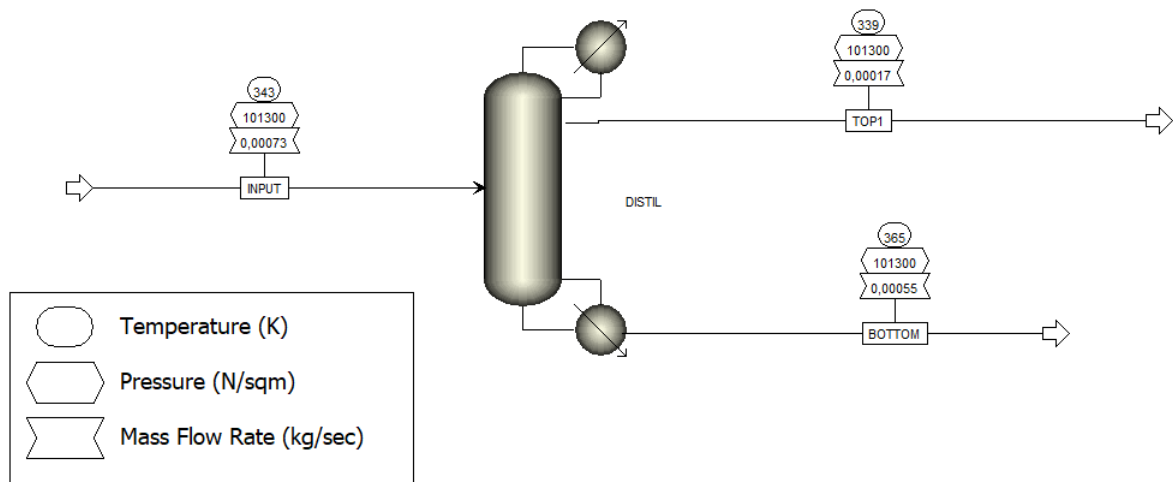


FIGURE 3.1 – Schéma-bloc de la colonne de distillation avec le logiciel Aspen

3.1.1 Résultats

Les spécifications de la colonne sont visibles sur la figure 3.2. La figure 3.3 montre les résultats de la simulation faite avec le logiciel Aspen. Ces résultats correspondent à l'état d'équilibre à trois endroits de la colonne : le distillat qui sort en haut de la colonne, le résidu en bas de la colonne et le flux d'alimentation.

Column specifications	
Number of stages	9
Feed stage	5
Reflux ratio	1.5
Distillate to feed mole ratio	0.16
Condenser type	Total
Pressure specifications	
Condenser pressure	1,013 bar
Reboiler pressure	1,013 bar

FIGURE 3.2 – Spécifications de la colonne de distillation avec le logiciel Aspen

	Units	TOP1	BOTTOM	INPUT
Phase		Liquid Phase	Liquid Phase	Liquid Phase
Temperature	K	338,648	365,37	343,15
Pressure	N/sqm	101300	101300	101300
Molar Vapor Fraction		0	0	0
Molar Liquid Fraction		1	1	1
Molar Solid Fraction		0	0	0
Mass Vapor Fraction		0	0	0
Mass Liquid Fraction		1	1	1
Mass Solid Fraction		0	0	0
Molar Enthalpy	J/kmol	-2,37459e+08	-2,78169e+08	-2,73406e+08
Mass Enthalpy	J/kg	-7,6215e+06	-1,4832e+07	-1,31832e+07
Molar Entropy	J/kmol-K	-221897	-150442	-165035
Mass Entropy	J/kg-K	-7122,04	-8021,61	-7957,75
Molar Density	kmol/cum	24,0043	48,0412	41,9928
Mass Density	kg/cum	747,886	900,993	870,885
Enthalpy Flow	Watt	-1329,54	-8176,77	-9567,57
Average MW		31,1564	18,7546	20,7389
- Mole Flows	kmol/sec	5,59905e-06	2,9395e-05	3,4994e-05
H2O	kmol/sec	3,53566e-07	2,78456e-05	2,81992e-05
METHANOL	kmol/sec	5,24548e-06	1,54936e-06	6,79484e-06
- Mole Fractions				
H2O		0,0631476	0,947292	0,805829
METHANOL		0,936853	0,0527082	0,194171

FIGURE 3.3 – Résultats de la simulation avec le logiciel Aspen

3.1.2 Avantages et inconvénients

L'avantage principal d'Aspen est qu'il s'agit d'un logiciel dans lequel de très nombreux modèles sont déjà implémentés. Il suffit donc à l'utilisateur de simplement sélectionner le bon modèle. Mais cela peut aussi être considéré comme un inconvénient car lorsqu'on doit choisir un modèle, on ne sait pas réellement quelles sont les équations qui se cachent derrière. Et donc sans connaître les équations, il est plus difficile de comprendre le comportement du système. Aspen est un excellent logiciel pour quelqu'un qui souhaite simuler un procédé chimique sans trop se soucier de la modélisation. La paramétrisation des modèles est également très complète. Pour chaque modèle, il existe des dizaines de paramètres. Un autre avantage d'Aspen est sa grande base de données pour de nombreux composés chimiques.

L'inconvénient majeur d'Aspen est que les simulations sont faites à l'état d'équilibre du système. L'un des objectifs de ce travail est de contrôler la colonne, or pour pouvoir construire un contrôleur, il faut les équations dynamiques du système. Cependant, il existe un logiciel appelé Aspen Dynamics qui permet justement de simuler l'évolution temporelle du système.

3.2 Premier modèle

3.2.1 Equations

Le modèle utilisé se base sur les modèles développés dans [11],[12],[13]. Pour modéliser le système dynamique, on discrétise la colonne en fonction du nombre de plateaux N . La colonne est ainsi divisée en $N + 2$ étages : 1 étage pour chaque plateau, 1 étage pour le boiler et 1 étage pour le condenseur. Pour chaque étage, on cherche à modéliser l'évolution de la fraction molaire de méthanol liquide x . En effet, étant donné que l'on distille un mélange binaire, en connaissant la fraction molaire de méthanol, on peut déduire la fraction molaire d'eau :

$$x_{eau} = 1 - x_{méth.} \quad (3.1)$$

En faisant l'hypothèse que les phases liquides et vapeurs sont en équilibre, on peut calculer la fraction molaire de vapeur de méthanol y grâce à la volatilité relative α :

$$y_i = \frac{\alpha x_i}{1 + (\alpha - 1)x_i} \quad (3.2)$$

Une hypothèse assez courante est de considérer que α est constant sur toute la colonne. En réalité, cette hypothèse est fautive car α dépend de la température. La figure 3.4 représente le diagramme de l'équilibre liquide-vapeur et compare les données expérimentales et l'approximation lorsqu'on considère α constant. On peut constater que l'approximation n'est pas trop mauvaise. Cependant, afin de s'affranchir de cette hypothèse dans notre modèle, y est calculé par interpolation numérique grâce à la fonction `interp1` de Matlab [14].

Pour simplifier notre modèle, les hypothèses suivantes sont faites :

- (i) la pression est constante dans la colonne
- (ii) les débits molaires de liquide et de vapeur sont constants dans la section de rectification et d'épuisement
- (iii) la vapeur en haut de la colonne qui passe dans le condenseur est totalement condensée

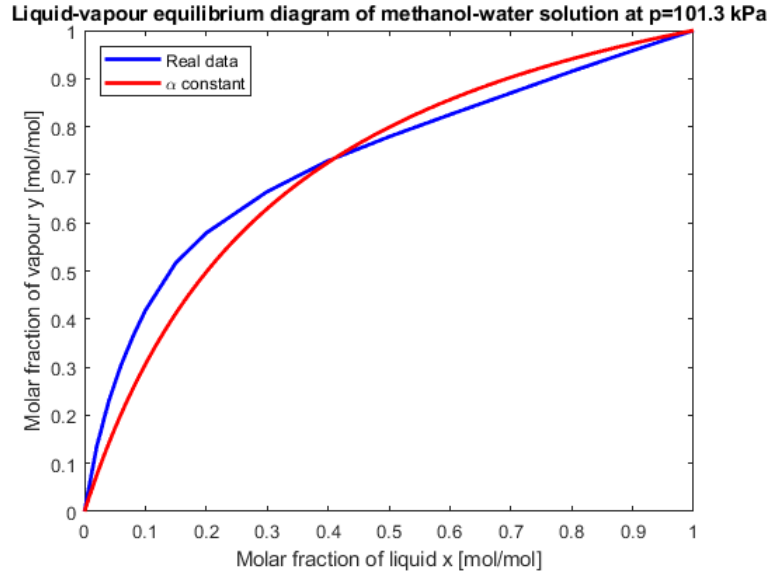


FIGURE 3.4 – Equilibre liquide-vapeur pour une solution méthanol/eau à une pression de 101,3 kPa. Comparaison entre les données expérimentales et l’approximation $y = \frac{\alpha x}{1+(\alpha-1)x}$ avec α constant

- (iv) le *holdup*¹ molaire liquide des plateaux, du condenseur et du boiler est constant
- (v) le *holdup* gazeux est négligeable

L’évolution de x_i est calculée en faisant un bilan de matière, c’est-à-dire en regardant la quantité qui rentre moins celle qui sort :

$$M_i \dot{x}_i = L_{i+1} x_{i+1} - L_i x_i + V_{i-1} y_{i-1} - V_i y_i \quad (3.3)$$

Grâce à l’hypothèses (ii), on peut exprimer les débits $L_{i+1}, L_i, V_i, V_{i-1}$ en fonction des débits d’alimentation liquide L_f et de vapeur V_f , du débit liquide de reflux L renvoyé dans le haut de la colonne et du débit de vapeur du boiler V . Les schémas des flux rentrant et sortant pour chaque étage de la colonne sont visibles sur les figures 3.5, 3.6, 3.7, 3.8 et 3.9.

1. Le *holdup* molaire liquide représente le nombre de moles de liquide qui sont retenues par le plateau.

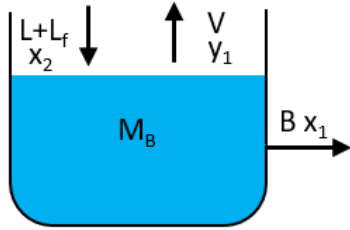


FIGURE 3.5 – Schéma des flux dans le boiler

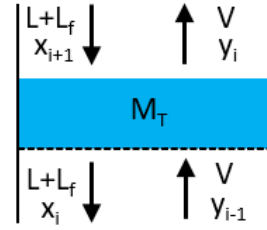


FIGURE 3.6 – Schéma des flux du plateau i dans la section d'épuisement

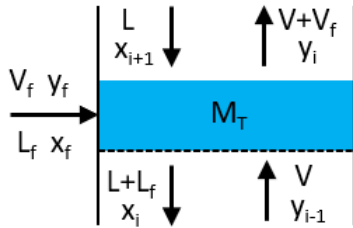


FIGURE 3.7 – Schéma des flux du plateau d'alimentation

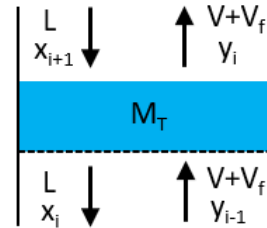


FIGURE 3.8 – Schéma des flux du plateau i dans la section de rectification

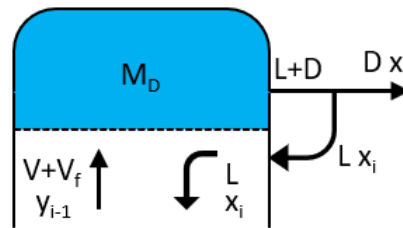


FIGURE 3.9 – Schéma des flux au niveau du condenseur

On obtient finalement les équations suivantes :

Boiler ($i = 1$) :

$$\dot{x}_1 = \frac{1}{M_B} ((L + L_f)x_2 - Vy_1 - Bx_1) \quad (3.4)$$

Section d'épuisement ($i = 2, \dots, n_f$) :

$$\dot{x}_i = \frac{1}{M_T} (V(y_{i-1} - y_i) + (L + L_f)(x_{i+1} - x_i)) \quad (3.5)$$

Plateau d'alimentation ($i = n_f + 1$) :

$$\dot{x}_i = \frac{1}{M_T} (V(y_{i-1} - y_i) + V_f(y_f - y_i) + L x_{i+1} - (L + L_f)x_i + L_f x_f) \quad (3.6)$$

Section de rectification ($i = n_f + 2, \dots, N + 1$) :

$$\dot{x}_i = \frac{1}{M_T} ((V + V_f)(y_{i-1} - y_i) + L(x_{i+1} - x_i)) \quad (3.7)$$

Condenseur ($i = N + 2$) :

$$\dot{x}_i = \frac{1}{M_D} ((V + V_f)y_{i-1} - L x_i - D x_i) \quad (3.8)$$

Symbole	Unité	Signification
B	mol/s	débit de résidu sortant du boiler
D	mol/s	débit de distillat sortant de la colonne
L	mol/s	débit liquide de reflux renvoyé dans le haut de la colonne
L_f	mol/s	débit liquide d'alimentation entrant dans la colonne
M_B	mol	<i>molar holdup</i> du boiler
M_D	mol	<i>molar holdup</i> du condenseur
M_T	mol	<i>molar holdup</i> d'un plateau
N	-	nombre de plateaux
n_f	-	numéro du plateau d'alimentation
R	-	ratio de reflux
V	mol/s	débit de vapeur dans la section d'épuisement
V_f	mol/s	débit de vapeur d'alimentation entrant dans la colonne
$x_B = x_1$	-	fraction molaire de méthanol liquide sortant du boiler
$x_D = x_{N+2}$	-	fraction molaire du distillat liquide sortant de la colonne
x_i	-	fraction molaire de méthanol liquide au plateau i
x_f	-	fraction molaire de méthanol liquide du flux d'alimentation
y_i	-	fraction molaire de vapeur de méthanol au plateau i
y_f	-	fraction molaire de vapeur de méthanol du flux d'alimentation
z_f	-	fraction molaire de méthanol du mélange d'alimentation (liquide et vapeur confondu)
α	-	volatilité relative

On peut ensuite calculer les débits D , B , L et V en faisant un bilan de matière. En effet, étant donné qu'il n'y a pas d'accumulation de matière dans la colonne, tout ce qui rentre doit être égal à tout ce qui sort. On obtient alors le système

d'équations suivant :

$$\begin{cases} V + V_f = L + D \\ L_f + V_f = B + D \\ z_f(L_f + V_f) = x_B B + x_D D \\ R = \frac{L}{D} \end{cases} \quad (3.9)$$

En résolvant le système (3.9), on obtient finalement :

$$\begin{cases} D = \frac{x_B - z_f}{x_B - x_D} (L_f + V_f) \\ B = \frac{z_f - x_D}{x_B - x_D} (L_f + V_f) \\ V = \frac{x_B - x_D}{x_B - z_f} (L_f + V_f)(1 + R) - V_f \\ L = \frac{x_B - z_f}{x_B - x_D} (L_f + V_f)R \end{cases} \quad (3.10)$$

Une fois le système d'équations différentielles ordinaires (EDO) résolu, on peut déduire la température T_i à partir de x_i grâce au diagramme d'équilibre liquide-vapeur (voir figure 3.10). Comme pour y_i , la température à chaque étage est calculée par interpolation numérique grâce à la fonction `interp1` de Matlab [14].

3.2.2 Résultats

Cette partie montre les résultats de la simulation numérique pour le premier modèle. La simulation a été réalisée via Matlab à l'aide du solveur `ode15s`. Pour ce système, le solveur `ode15s` a été privilégié par rapport à `ode45` car nous avons à faire à un problème raide. Les valeurs des paramètres utilisés pour la simulation sont visibles dans le tableau 3.1.

Les figures 3.11 et 3.12 représentent respectivement l'évolution de la fraction molaire liquide x_i et de vapeur y_i pour chaque plateau lorsque l'on fait varier le ratio de reflux R (voir figure 3.14). On observe que lorsqu'on augmente le ratio de reflux R (à $t = 300$ s), on obtient une meilleure séparation du mélange. En effet, on constate une augmentation de la concentration en distillat ($x_D = 0,98$) en haut de la colonne et une diminution de la concentration en sortie du boiler ($x_B = 0,03$). Ce comportement est normal, en augmentant R , on augmente la quantité de distillat

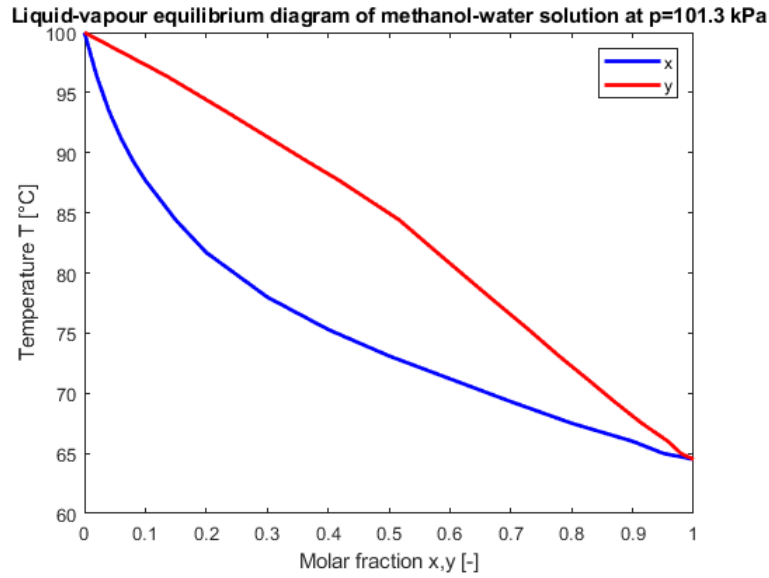


FIGURE 3.10 – Equilibre liquide-vapeur pour une solution méthanol/eau à une pression de 101,3 kPa

TABLE 3.1 – Valeur des paramètres utilisés dans le modèle

Variable	Valeur	Unité
L_f	0,0319	<i>mol/s</i>
V_f	0	<i>mol/s</i>
z_f	0,3	-
x_f	0,3	-
y_f	0	-
M_B	0,1	<i>mol</i>
M_D	0,25	<i>mol</i>
M_T	0,5	<i>mol</i>
N	9	-
n_f	5	-

qui est renvoyé dans la colonne et donc on augmente le contact entre la vapeur et le liquide ce qui augmente la pureté du distillat. L'évolution de la température visible sur la figure 3.13 correspond également au comportement attendu. La température dans le bas de la colonne augmente tout en restant inférieure à la température d'ébullition de l'eau ($T_B = 94$ °C), tandis que le température en haut diminue pour se rapprocher de la température d'ébullition du méthanol ($T_D = 64,54$ °C).

On peut également déterminer le temps de réponse du système c'est-à-dire le

temps que met le système pour se stabiliser. Ce temps de réponse est d'environ 1500s (25 minutes). Ce temps de réponse correspond à ce qui a été observé par les chercheurs de l'université de Bratislava lors de leurs expériences faites avec la colonne UOP3CC de Armfield [3],[4],[5]. Les paramètres qui sont les plus influents sur le temps de réponse sont les *holdup* molaires M_B , M_D et M_T . En effet, on observe sur les figures 3.15, 3.16, 3.17 qu'en augmentant M_B , M_D et M_T , le temps de réponse augmente de manière proportionnelle.

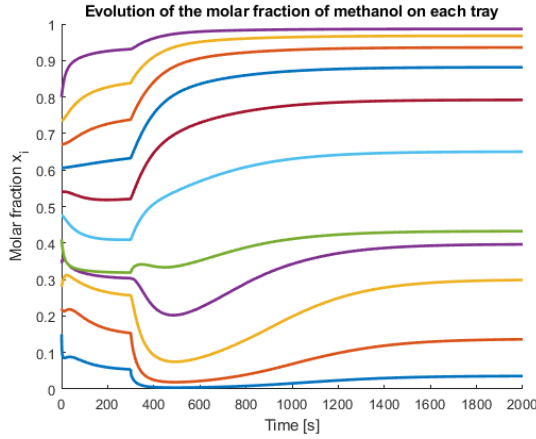


FIGURE 3.11 – Evolution de la fraction molaire x_i pour chaque plateau avec $M_T = 0,5$; $M_B = 0,1$; $M_D = 0,25$

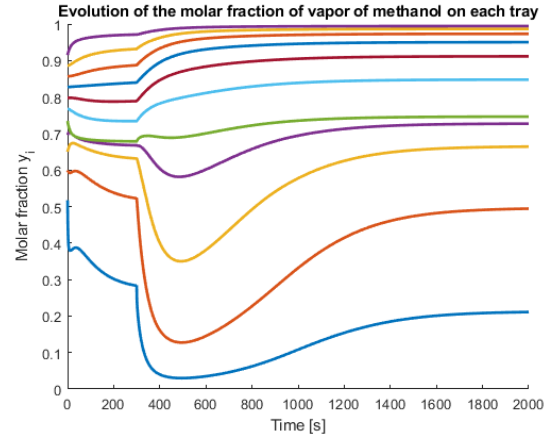


FIGURE 3.12 – Evolution de la fraction molaire y_i pour chaque plateau avec $M_T = 0,5$; $M_B = 0,1$; $M_D = 0,25$

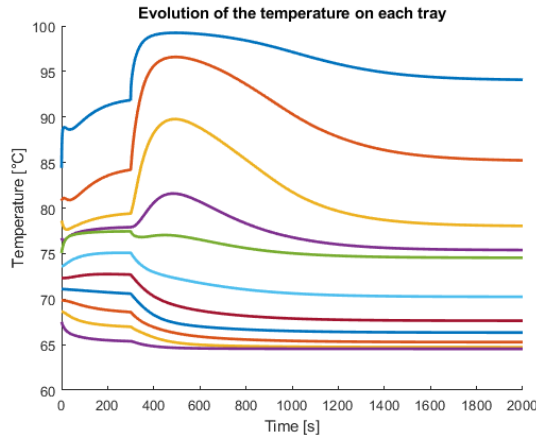


FIGURE 3.13 – Evolution de la température T_i pour chaque plateau avec $M_T = 0,5$; $M_B = 0,1$; $M_D = 0,25$

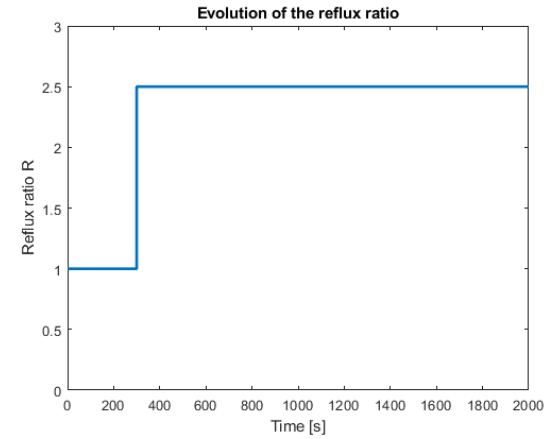


FIGURE 3.14 – Evolution du ratio de reflux R

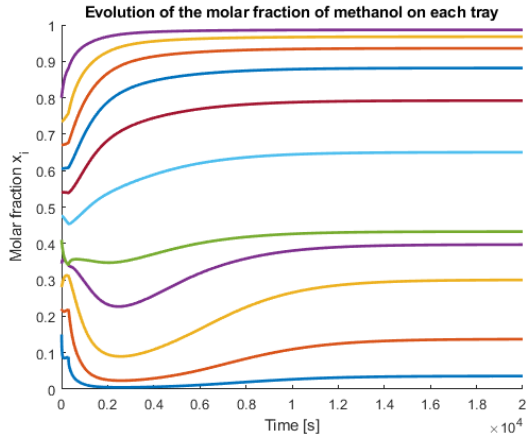


FIGURE 3.15 – Evolution de la fraction molaire x_i pour chaque plateau avec $M_T = 5$; $M_B = 1$; $M_D = 2,5$

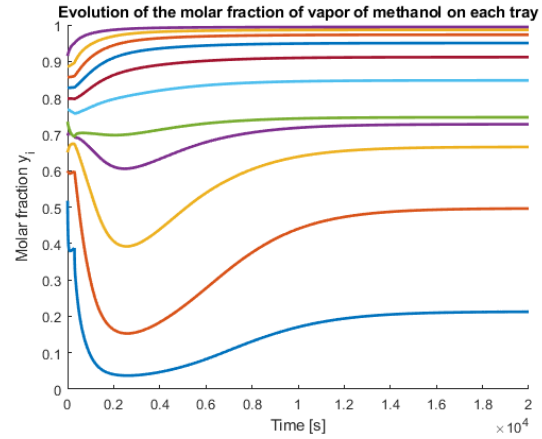


FIGURE 3.16 – Evolution de la fraction molaire y_i pour chaque plateau avec $M_T = 5$; $M_B = 1$; $M_D = 2,5$

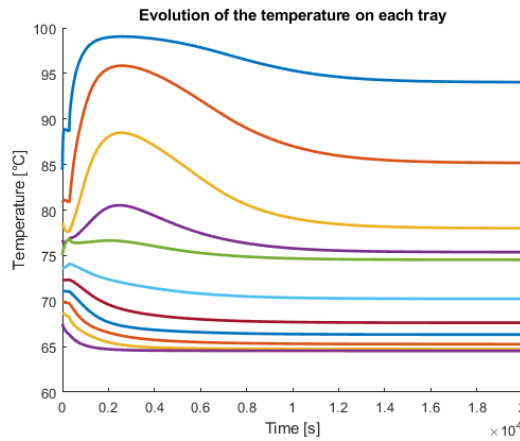


FIGURE 3.17 – Evolution de la température T_i pour chaque plateau avec $M_T = 5$; $M_B = 1$; $M_D = 2,5$

3.3 Deuxième modèle

Le problème principal du premier modèle est qu'il ne tient pas compte de manière explicite de l'évolution de la température dans la colonne. En effet, le seul endroit où la température intervient dans ce modèle est lorsqu'on calcule y_i par interpolation (car α varie en fonction de la température) sur base des données expérimentales du diagramme d'équilibre liquide-vapeur. Or si l'on fait l'hypothèse que α est constant sur toute la colonne, ce qui est une hypothèse qui

est régulièrement faite [11], [13], cela implique que la température n'a plus aucune influence sur x_i et y_i ce qui est bien évidemment absurde. Ce deuxième modèle a donc pour objectif de calculer et de faire intervenir explicitement la température dans les équations du système.

3.3.1 Equations

Comme expliqué précédemment, on sait que la volatilité relative α dépend de la température. En observant la figure 3.18, on constate que α varie linéairement avec la température. On peut donc calculer α avec l'approximation suivante :

$$\alpha(T) = a + bT \quad \text{avec } a = -57,245 \text{ et } b = 0,176 \quad (3.11)$$

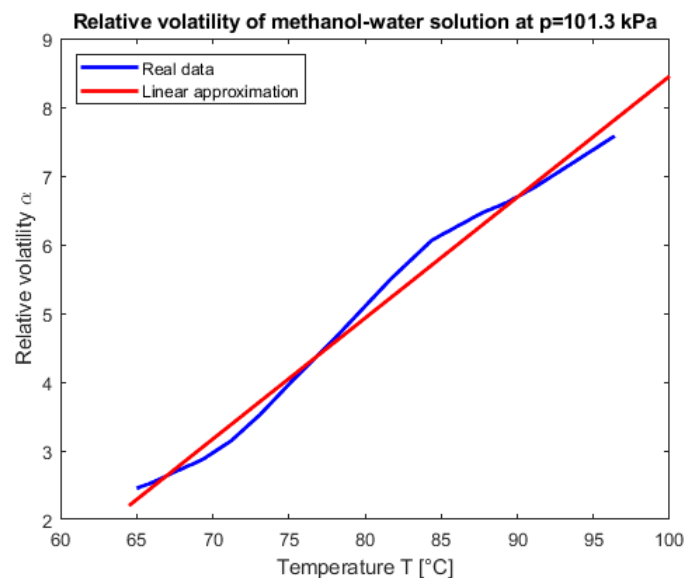


FIGURE 3.18 – Volatilité relative en fonction de la température pour une solution méthanol/eau à une pression de 101,3 kPa

Grâce à l'approximation (3.11), on peut calculer la fraction molaire de vapeur de méthanol y_i en fonction de la température T_i et de x_i :

$$y_i(x_i, T_i) = \frac{\alpha(T_i)x_i}{1 + (\alpha(T_i) - 1)x_i} \quad (3.12)$$

$$= \frac{(a + bT_i)x_i}{1 + (a + bT_i - 1)x_i} \quad (3.13)$$

En observant la figure 3.19 qui compare plusieurs approximations pour le diagramme d'équilibre liquide-vapeur, on constate que l'approximation (3.13) colle très bien avec les données expérimentales.

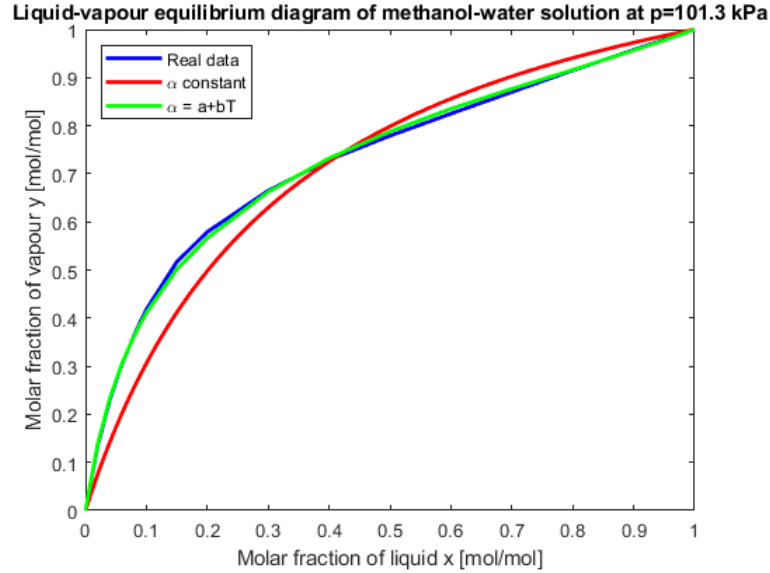


FIGURE 3.19 – Equilibre liquide-vapeur pour une solution méthanol/eau à une pression de 101,3 kPa. Comparaison entre les données expérimentales et l'approximation $y = \frac{\alpha x}{1+(\alpha-1)x}$ avec α constant et $\alpha = a + bT$

Maintenant que nous avons exprimé y_i en fonction de la température, il nous faut modéliser l'évolution de la température T_i . Cette évolution est calculée en faisant un bilan d'énergie à chaque étage de la colonne :

$$\Delta U_i = Q_{in,i} - Q_{out,i} + Q_{gen,i} - Q_{cons,i} \quad (3.14)$$

$$\Rightarrow \frac{d\Delta U_i}{dt} = \dot{Q}_{in,i} - \dot{Q}_{out,i} + \dot{Q}_{gen,i} - \dot{Q}_{cons,i} \quad (3.15)$$

avec

- ΔU_i : variation d'énergie de l'étage i
- $Q_{in,i}$: énergie qui rentre dans l'étage i
- $Q_{out,i}$: énergie qui sort de l'étage i
- $Q_{gen,i}$: énergie générée à l'étage i
- $Q_{cons,i}$: énergie consommée à l'étage i

En plus des hypothèses énoncées pour le premier modèle, on suppose que

- (i) la pression est constante dans la colonne

- (ii) la capacité thermique molaire à pression constante C_p ne dépend pas de la température
- (iii) l'enthalpie de vaporisation ΔH_{vap} est négligeable

L'hypothèse (iii) semble raisonnable car on suppose que le *holdup* molaire à chaque étage est constant. Cela implique donc que pour chaque mole de méthanol qui se vaporise, il y a une mole d'eau qui se condense et inversement. Leur enthalpie de vaporisation se compense donc plus ou moins.

Sur base de ces hypothèses, on obtient à partir de la formule de l'enthalpie molaire lorsque la pression est constante :

$$dh = C_p dT \Rightarrow \frac{dh}{dt} = C_p \frac{dT}{dt} \quad (3.16)$$

$$\Rightarrow h = C_p \Delta T \quad (3.17)$$

avec

- h : l'enthalpie molaire [J/mol]
- C_p : la capacité thermique molaire à pression constante [$J/(K mol)$]
- T : la température [K]

L'évolution de la température T_i à l'étage i est donc donnée par :

$$M_i C_{p,i}^L \frac{dT_i}{dt} = L_{i+1} h_{i+1}^L - L_i h_i^L + V_{i-1} h_{i-1}^V - V_i h_i^V \quad (3.18)$$

$$\begin{aligned} \frac{dT_i}{dt} &= \frac{1}{M_i C_{p,i}^L} \left(L_{i+1} C_{p,i+1}^L (T_{i+1} - T_i) - L_i C_{p,i}^L (T_i - T_{i-1}) \right. \\ &\quad \left. + V_{i-1} C_{p,i-1}^V (T_{i-1} - T_i) - V_i C_{p,i}^V (T_i - T_{i+1}) \right) \end{aligned} \quad (3.19)$$

avec $C_{p,i}^L$ et $C_{p,i}^V$ défini par :

$$\begin{aligned} C_{p,i}^L &:= x_i C_{p,méth.}^L + (1 - x_i) C_{p,eau}^L \\ C_{p,i}^V &:= y_i C_{p,méth.}^V + (1 - y_i) C_{p,eau}^V \end{aligned}$$

Pour l'équation de la température au niveau du boiler et du plateau d'alimentation, il faut tenir compte respectivement de l'énergie apportée par le boiler et du flux d'alimentation qui transporte également une quantité d'énergie. Concernant l'équation du condenseur, on considère que la température en sortie de ce dernier

est toujours constante et égale à T_D . Les équations qui modélisent l'évolution de x_i par rapport au temps, sont identiques aux équations développées dans le premier modèle. On obtient finalement le système suivant :

Boiler ($i = 1$) :

$$\frac{dx_1}{dt} = \frac{1}{M_B} ((L + L_f)x_2 - Vy_1 - Bx_1) \quad (3.20)$$

$$\begin{aligned} \frac{dT_1}{dt} = & \frac{1}{M_B C_{p,1}^L} \left((L + L_f)C_{p,2}^L(T_2 - T_1) - VC_{p,1}^V(T_1 - T_2) \right. \\ & \left. - B \left(C_{p,1}^L(T_1 - T_{ref}) + x_1 \Delta h_{f,méth.}^\circ + (1 - x_1) \Delta h_{f,eau}^\circ \right) + P_b \right) \end{aligned} \quad (3.21)$$

Section d'épuisement ($i = 2, \dots, n_f$) :

$$\frac{dx_i}{dt} = \frac{1}{M_T} (V(y_{i-1} - y_i) + (L + L_f)(x_{i+1} - x_i)) \quad (3.22)$$

$$\begin{aligned} \frac{dT_i}{dt} = & \frac{1}{M_T C_{p,i}^L} \left((L + L_f)C_{p,i+1}^L(T_{i+1} - T_i) - (L + L_f)C_{p,i}^L(T_i - T_{i-1}) \right. \\ & \left. + VC_{p,i-1}^V(T_{i-1} - T_i) - VC_{p,i}^V(T_i - T_{i+1}) \right) \end{aligned} \quad (3.23)$$

Plateau d'alimentation ($i = n_f + 1$) :

$$\frac{dx_i}{dt} = \frac{1}{M_T} (V(y_{i-1} - y_i) + V_f(y_f - y_i) + L x_{i+1} - (L + L_f)x_i + L_f x_f) \quad (3.24)$$

$$\begin{aligned} \frac{dT_i}{dt} = & \frac{1}{M_T C_{p,i}^L} \left(LC_{p,i+1}^L(T_{i+1} - T_i) - (L + L_f)C_{p,i}^L(T_i - T_{i-1}) + VC_{p,i-1}^V(T_{i-1} - T_i) \right. \\ & \left. - (V + V_f)C_{p,i}^V(T_i - T_{i+1}) + L_f C_{p,f}^L(T_f - T_i) + V_f C_{p,f}^V(T_f - T_i) \right) \end{aligned} \quad (3.25)$$

Section de rectification ($i = n_f + 2, \dots, N + 1$) :

$$\frac{dx_i}{dt} = \frac{1}{M_T} ((V + V_f)(y_{i-1} - y_i) + L(x_{i+1} - x_i)) \quad (3.26)$$

$$\begin{aligned} \frac{dT_i}{dt} = & \frac{1}{M_T C_{p,i}^L} \left(LC_{p,i+1}^L(T_{i+1} - T_i) - LC_{p,i}^L(T_i - T_{i-1}) \right. \\ & \left. + (V + V_f)C_{p,i-1}^V(T_{i-1} - T_i) - (V + V_f)C_{p,i}^V(T_i - T_{i+1}) \right) \end{aligned} \quad (3.27)$$

Condenseur ($i = N + 2$) :

$$\frac{dx_i}{dt} = \frac{1}{M_D} ((V + V_f)y_{i-1} - L x_i - D x_i) \quad (3.28)$$

$$\frac{dT_i}{dt} = \frac{1}{M_D C_{p,i}^L} \left((V + V_f)C_{p,i-1}^V(T_{i-1} - T_i) - (L + D)C_{p,i}^L(T_i - T_D) \right) \quad (3.29)$$

Symbole	Unité	Signification
B	mol/s	débit de résidu sortant du boiler
$C_{p,eau}^L$	$J/(K mol)$	capacité thermique molaire de l'eau liquide à pression constante
$C_{p,méth.}^L$	$J/(K mol)$	capacité thermique molaire du méthanol liquide à pression constante
$C_{p,eau}^V$	$J/(K mol)$	capacité thermique molaire de l'eau à l'état gazeux à pression constante
$C_{p,méth.}^V$	$J/(K mol)$	capacité thermique molaire du méthanol à l'état gazeux à pression constante
$C_{p,i}^L$	$J/(K mol)$	capacité thermique molaire du liquide à pression constante au plateau i
$C_{p,i}^V$	$J/(K mol)$	capacité thermique molaire de la vapeur à pression constante au plateau i
D	mol/s	débit de distillat sortant de la colonne
L	mol/s	débit liquide de reflux renvoyé dans le haut de la colonne
L_f	mol/s	débit liquide d'alimentation entrant dans la colonne
M_B	mol	<i>molar holdup</i> du boiler
M_D	mol	<i>molar holdup</i> du condenseur
M_T	mol	<i>molar holdup</i> d'un plateau
N	-	nombre de plateaux
n_f	-	numéro du plateau d'alimentation
P_b	W	puissance du boiler
R	-	ratio de reflux
T_i	K	température à l'étage i
T_D	K	température en sortie du condenseur
T_f	K	température du flux d'alimentation
T_{ref}	K	température de référence pour l'enthalpie standard de formation
V	mol/s	débit de vapeur dans la section d'épuisement
V_f	mol/s	débit de vapeur d'alimentation entrant dans la colonne
$x_B = x_1$	-	fraction molaire de méthanol liquide sortant du boiler
$x_D = x_{N+2}$	-	fraction molaire du distillat liquide sortant de la colonne
x_i	-	fraction molaire de méthanol liquide au plateau i
x_f	-	fraction molaire de méthanol liquide du flux d'alimentation
y_i	-	fraction molaire de vapeur de méthanol au plateau i
y_f	-	fraction molaire de vapeur de méthanol du flux d'alimentation
z_f	-	fraction molaire de méthanol du mélange d'alimentation (liquide et vapeur confondu)
α	-	volatilité relative
$\Delta h_{f,eau}^\circ$	J/mol	enthalpie standard de formation de l'eau à la température T_{ref}
$\Delta h_{f,méth.}^\circ$	J/mol	enthalpie standard de formation du méthanol à la température T_{ref}

3.3.2 Résultats

Cette partie montre les résultats de la simulation numérique du deuxième modèle. Tout comme pour le premier modèle, la simulation a été résolue via le solveur `ode15s` de Matlab. Les valeurs des paramètres utilisés pour la simulation sont visibles dans le tableau 3.2.

TABLE 3.2 – Valeur des paramètres utilisés dans le modèle

Variable	Valeur	Unité
L_f	0,0319	<i>mol/s</i>
V_f	0	<i>mol/s</i>
z_f	0,3	-
x_f	0,3	-
y_f	0	-
M_B	0,1	<i>mol</i>
M_D	0,25	<i>mol</i>
M_T	0,5	<i>mol</i>
T_f	75	°C
T_D	64,5	°C
N	9	-
n_f	5	-

La première remarque à faire concernant ce modèle est le problème de puissance du boiler. En effet, dans la simulation, la puissance requise pour chauffer l'ensemble de la colonne est de seulement 10W, tandis que dans la réalité, le boiler de la colonne de Armfield a une puissance de 2500W. Une grosse partie de la puissance sert à compenser les pertes de chaleur pour des petites colonnes de laboratoire de cette taille-là (à cause de leur mauvaise isolation). Cependant, cette explication ne peut pas justifier une telle différence de puissance entre la simulation et la réalité. Il doit donc y avoir un problème dans la modélisation de l'évolution de la température. Malheureusement, après de nombreuses semaines d'investigation, nous n'avons pas réussi à trouver la cause du problème. L'une des pistes d'explication était l'hypothèse (iii) qui néglige l'enthalpie de vaporisation. Cependant, même en prenant en compte cette enthalpie, le problème de puissance persiste.

Les figures 3.20 et 3.21 représentent respectivement l'évolution de la fraction molaire liquide x_i et de vapeur y_i pour chaque plateau lorsque l'on fait varier le ratio de reflux R et la puissance du boiler (voir figures 3.22 et 3.23). On observe que lorsque le ratio de reflux R diminue (à $t = 1000$ s), la pureté du distillat en haut de la colonne diminue. Ce type de résultat est conforme avec ce qu'on observe

de manière expérimentale. On constate également que la puissance du boiler a un impact beaucoup plus faible sur la concentration de méthanol en sortie de la colonne que le ratio de reflux. En effet, lorsque l'on augmente la puissance P_b (à $t = 2000$ s), l'effet sur la concentration est à peine perceptible. Le ratio de reflux semble donc être un meilleur paramètre que la puissance pour contrôler la concentration de distillat en sortie de la colonne.

La figure 3.24 compare l'évolution de la température entre le premier et le deuxième modèle. On observe que pour le deuxième modèle, au plus on monte dans la colonne, au moins la température varie rapidement. En effet, on constate que le profil de température au niveau du condenseur est quasiment constant, tandis que la température en bas de la colonne est très sensible à la variation du ratio de reflux et à la puissance du boiler. Si l'on compare à présent les résultats entre les deux modèles, on peut voir que les deux systèmes réagissent de manière opposée lors du changement du ratio de reflux. De plus, on observe que le premier modèle est beaucoup plus sensible que le deuxième modèle lors d'une variation de R . Tandis que lorsque l'on augmente P_b (à $t = 2000$ s), le deuxième modèle réagit beaucoup plus que le premier ce qui est tout à fait logique étant donné que la puissance du boiler intervient de manière explicite dans les équations du deuxième modèle.

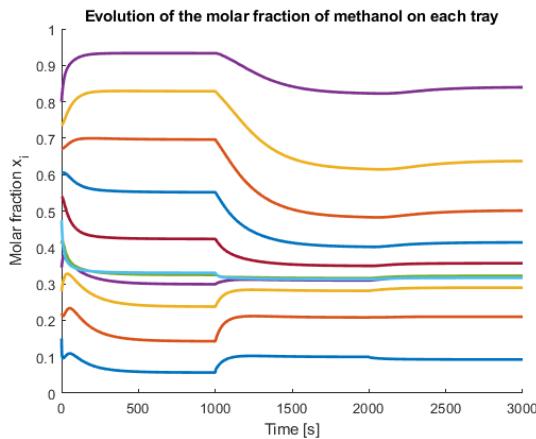


FIGURE 3.20 – Evolution de la fraction molaire x_i pour chaque plateau

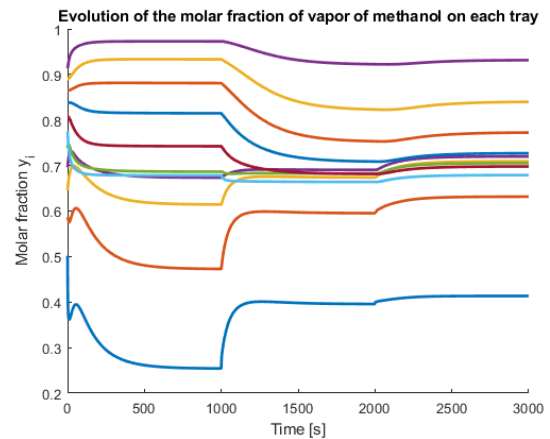


FIGURE 3.21 – Evolution de la fraction molaire y_i pour chaque plateau

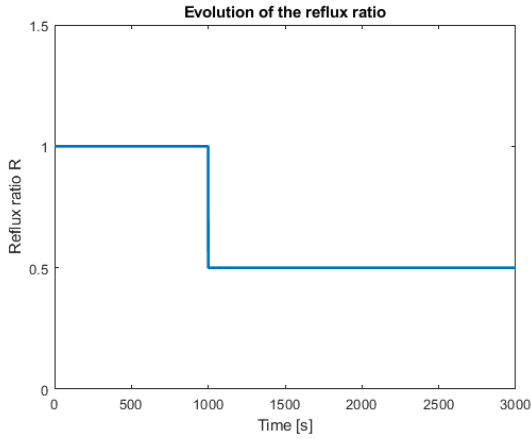


FIGURE 3.22 – Evolution du ratio de reflux R

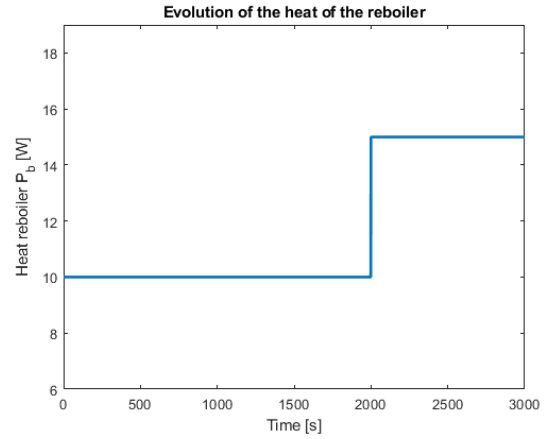


FIGURE 3.23 – Evolution de la puissance du boiler P_b

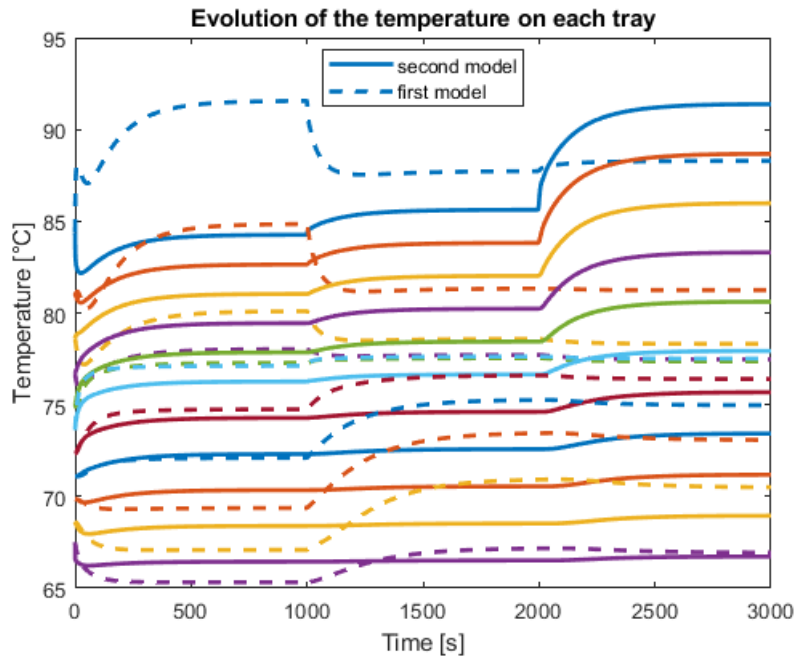


FIGURE 3.24 – Evolution de la température T_i pour chaque plateau. Comparaison entre le premier modèle et le deuxième modèle

3.3.3 Contrôle du système

Intéressons nous à présent au contrôle de la colonne de distillation. L'objectif du contrôleur est de trouver une commande permettant d'atteindre la concentration de

méthanol souhaitée par l'utilisateur en sortie de la colonne. Cette concentration désirée par l'utilisateur est appelée la consigne et symbolisée par la variable r . De plus, il faut *designer* un contrôleur performant qui permet d'atteindre la consigne le plus rapidement possible.

La première étape avant de *designer* le contrôleur, est de choisir quelles sont les variables qui permettent de contrôler le système. Dans notre cas, il existe 3 paramètres :

- le ratio de reflux R
- la puissance du boiler P_b
- la composition du flux d'alimentation

Comme nous l'avons constaté précédemment, la puissance du boiler n'a pas un très grand impact sur la pureté du distillat en sortie. Il ne s'agit donc pas d'un très bon paramètre de contrôle. Concernant la composition du flux d'alimentation, il s'agit de paramètres qui ne sont souvent pas choisis par l'utilisateur. En général, la variation de la composition du flux d'alimentation est plutôt considérée comme une perturbation du système et est souvent de nature aléatoire. Nous allons donc utiliser le ratio de reflux comme commande du système.

Concernant la structure du contrôleur, nous avons choisi d'utiliser un régulateur PI (proportionnel intégral) avec un mécanisme d'anti-emballement (*anti-windup*). L'avantage du régulateur PI est que c'est un contrôleur assez simple et qui fonctionne pour énormément de systèmes. La raison pour laquelle on utilise un régulateur PI à la place d'un PID (proportionnel intégral dérivé) est que la partie dérivée est sensible au bruit. Or, comme mentionné précédemment, la composition du flux d'entrée peut être considérée comme une perturbation aléatoire. Le mécanisme d'anti-emballement permet quant à lui d'éviter que la commande ne sature trop longtemps et ainsi éviter le phénomène d'emballement. En effet, si l'on regarde la définition du ratio de reflux, on constate que R appartient à l'ensemble des réels positifs :

$$R := \frac{L}{D} \quad \text{avec } L, D \in \mathbb{R}^+ \Rightarrow R \in \mathbb{R}^+ \quad (3.30)$$

L'équation du régulateur PI avec un mécanisme d'anti-emballement est la suivante :

$$u_c(t) = K_p e(t) + K_i \int_0^t e(\tau) + K_s (\text{sat}(u(t)) - u(t)) d\tau \quad (3.31)$$

avec

- $e(t) = r(t) - x_D(t)$ l'erreur

- $sat(u(t)) = \begin{cases} 0 & \text{si } u(t) \leq 0 \\ u(t) & \text{si } u(t) > 0 \end{cases}$

Les valeurs des paramètres K_p et K_i peuvent être obtenus à l'aide de la méthode de Ziegler-Nichols en temporelle ou en faisant du *manual tuning*. Le paramètre d'anti emballement K_s est également obtenu par *manual tuning*. On obtient alors les valeurs suivantes :

K_p	K_i	K_s
35	0,1	0,03

Nous allons à présent discuter des résultats et des performances obtenues avec le contrôleur PI + le mécanisme d'anti emballement. Les résultats de la simulation sont obtenus en utilisant le deuxième modèle. La puissance du boiler est fixé à 10W et les valeurs des autres paramètres utilisés sont visibles dans le tableau 3.2.

La figure 3.25 montre l'évolution de la sortie du système (c'est-à-dire x_D) lorsque l'on fait varier la référence r . Cette figure compare également les performances entre un contrôleur PI et un PI + un mécanisme d'anti emballement. On observe que le contrôleur est efficace et arrive à atteindre la consigne demandée en un temps d'environ 500 secondes. Pour rappel, le temps de réponse du système en boucle ouverte est de 1500 secondes. On peut également remarquer que dans la première moitié du graphe (pour $t < 1500 s$), aucun *overshoot* n'est observé. Tandis que lorsqu'on baisse la consigne (pour $t > 1500 s$), un *overshoot* apparaît. L'apparition de cet *overshoot* est dû à une saturation de la commande. En effet, en observant la figure 3.26 qui montre la commande R associée aux contrôleurs, on constate effectivement une saturation de la commande à partir de 1500 secondes. On remarque également sur cette figure que la commande sature moins longtemps avec le mécanisme d'anti emballement que lorsqu'on utilise uniquement un contrôleur PI. L'effet du mécanisme d'anti emballement permet donc d'avoir de meilleures performances du système lorsque la commande sature. En effet, sur la figure 3.25, on constate que l'*overshoot* est beaucoup plus petit et que le système converge plus rapidement vers la consigne lorsqu'on utilise un PI + un mécanisme d'anti emballement plutôt qu'avec uniquement un PI.

Les résultats de l'évolution des fractions molaires x_i , y_i et de la température T_i sont visibles respectivement sur les figures 3.27, 3.28 et 3.29.

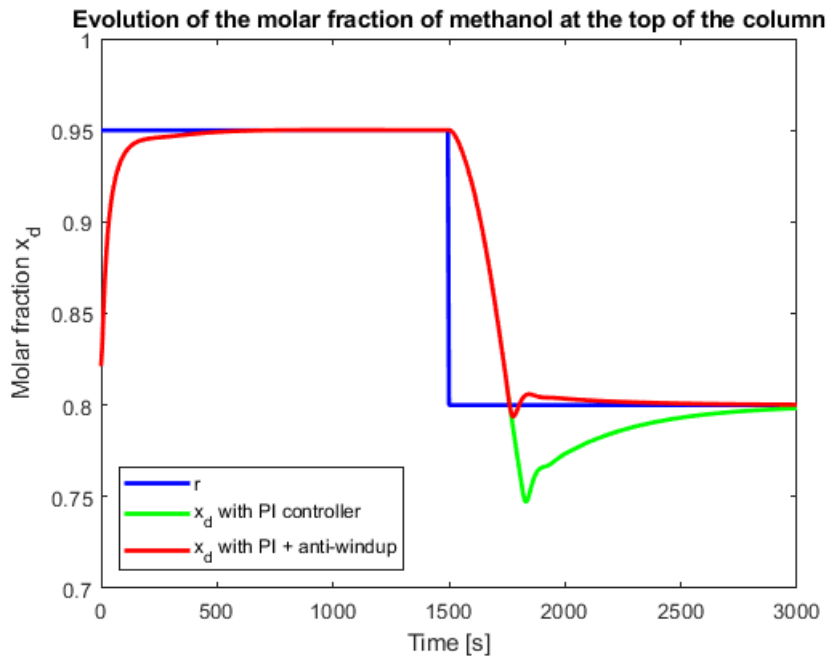


FIGURE 3.25 – Evolution de la fraction molaire x_D en sortie de colonne avec un contrôleur PI et un PI + mécanisme d’anti emballement

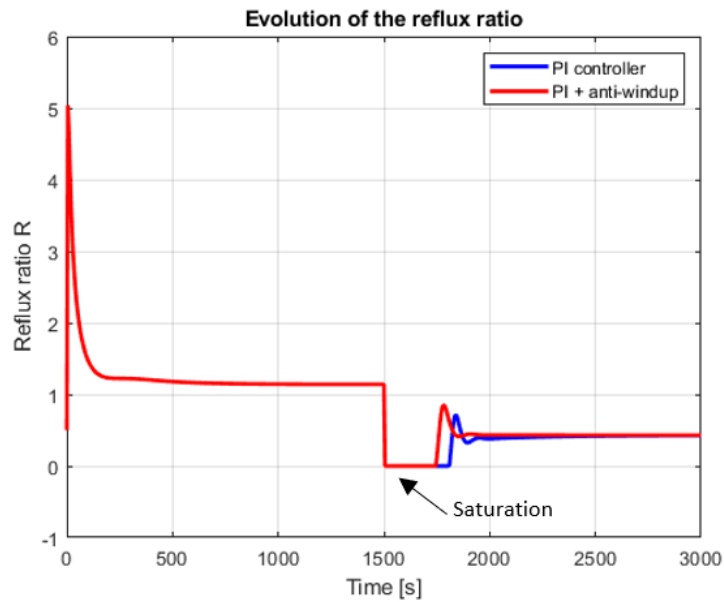


FIGURE 3.26 – Evolution du ratio de reflux R avec un contrôleur PI et un PI + mécanisme d’anti emballement

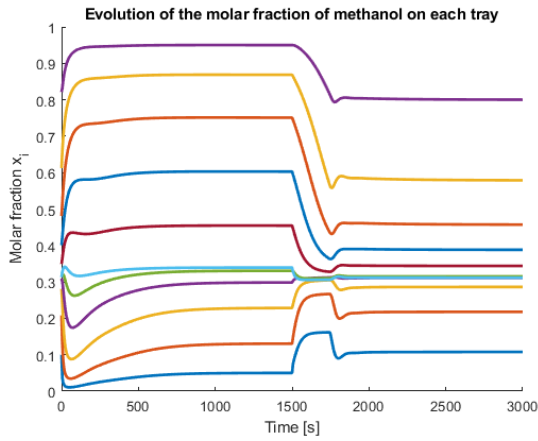


FIGURE 3.27 – Evolution de la fraction molaire x_i pour chaque plateau

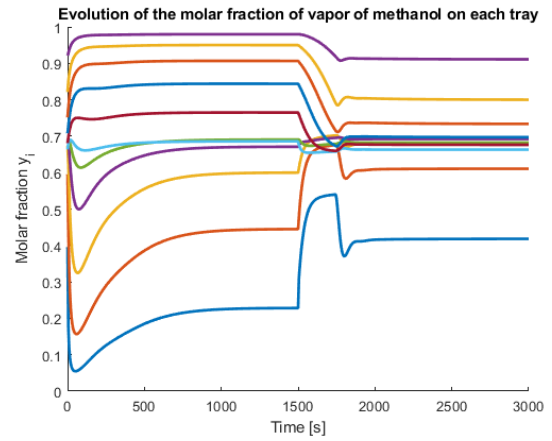


FIGURE 3.28 – Evolution de la fraction molaire y_i pour chaque plateau

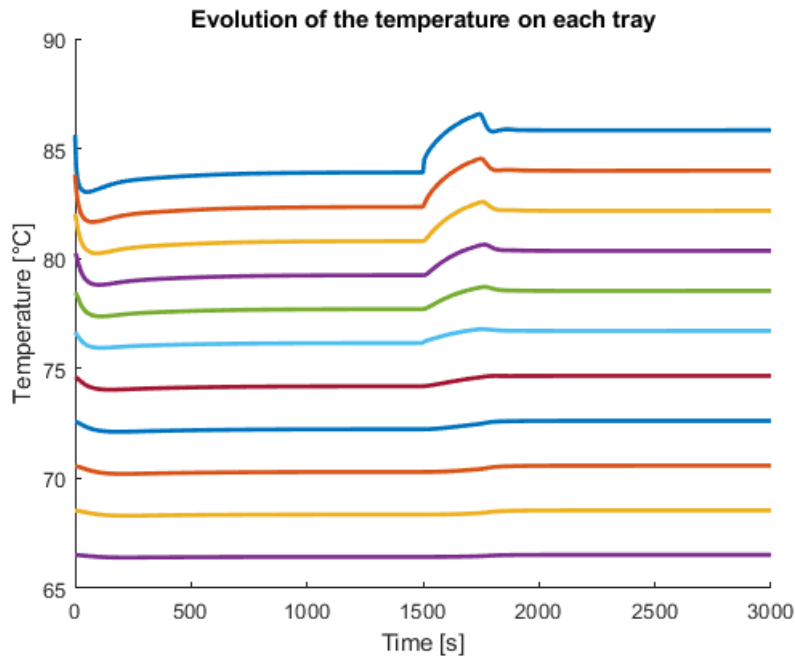


FIGURE 3.29 – Evolution de la température T_i pour chaque plateau

3.3.4 Analyse du système

Dans cette section, nous allons nous intéresser à l'analyse du système en boucle ouverte. Pour cela, on va d'abord analyser la stabilité du système. Ensuite nous

observerons la réponse indicielle. Et pour finir, nous étudierons l'observabilité et la contrôlabilité du système.

La première étape pour pouvoir analyser le système est de le linéariser autour d'un équilibre afin d'avoir un système de la forme :

$$\begin{cases} \dot{x}(t) = Ax(t) + Bu(t) \\ y(t) = Cx(t) \end{cases} \quad (3.32)$$

Remarque : les variables $x(t)$ et $y(t)$ du système (3.32) ne représentent pas les fractions molaires de liquide et de vapeur. Ici, le vecteur x représente les variables d'état du système et y la sortie du système. Dans notre cas, on a donc :

$$x = \begin{bmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_{N+2} \\ T_1 \\ \vdots \\ T_{N+2} \end{bmatrix} \quad \text{et} \quad y = x_{N+2} \quad (3.33)$$

Le vecteur $u(t)$ représente quant à lui les commandes du système. Dans notre cas, il s'agit du ratio de reflux, nous avons $u = R$.

Considérons le système non-linéaire suivant :

$$\dot{x}(t) = f(x(t), u(t)) \quad (3.34)$$

Pour rappel, le système linéarisé autour de l'équilibre (x^*, u^*) est calculé avec :

$$A := \left. \frac{\partial f}{\partial x} \right|_{x^*, u^*} \quad \text{et} \quad B := \left. \frac{\partial f}{\partial u} \right|_{x^*, u^*} \quad (3.35)$$

Dans notre cas, la matrice C est un vecteur nul de taille $1 \times (2N + 4)$ excepté pour l'élément C_{N+2} qui vaut 1 :

$$C = [0 \quad \dots \quad 1 \quad 0 \quad \dots \quad 0] \quad (3.36)$$

Concernant le point d'équilibre (x^*, u^*) , nous avons choisi de prendre l'état du système lorsqu'on applique un ratio de reflux $R = 0,5$. Après avoir linéarisé le système autour de cet équilibre, on obtient un système avec une matrice A de taille 22×22 , une matrice B de taille 22×1 et une matrice C de taille 1×22 . La matrice A est une matrice creuse composée de 113 éléments non nuls. Le *sparsity pattern* de la matrice A est visible sur la figure 3.30.

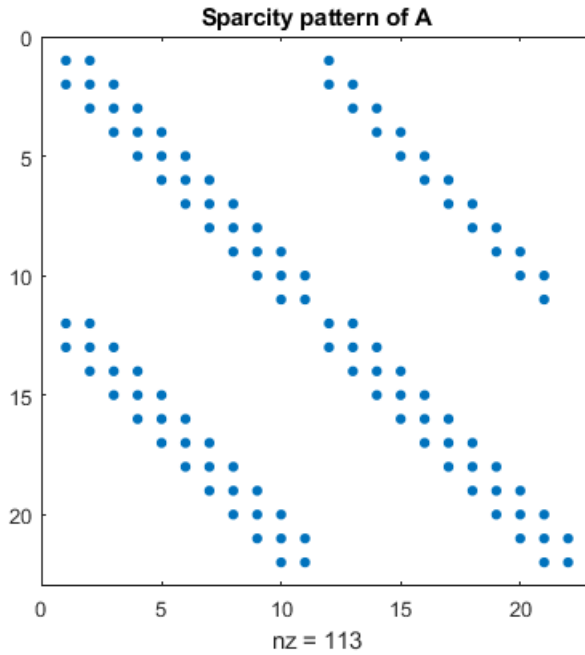


FIGURE 3.30 – *Scarcity pattern* de la matrice A

Stabilité

Analysons à présent la stabilité du système. Pour rappel, un système est stable si la partie réelle de toutes les valeurs propres de la matrice A sont strictement négatives :

$$\Re(\lambda_i) < 0, \forall i \quad \text{où } \lambda_i \text{ sont les valeurs propres de } A \quad (3.37)$$

Lorsqu'on calcule les valeurs propres de la matrice A , on se rend compte qu'elles ont toutes une partie réelle strictement négative. On peut donc conclure que le système linéarisé est stable. De plus, grâce au théorème d'Hartman-Grobman, on peut également conclure que l'équilibre du système non-linéaire est stable. En effet, l'équilibre (x^*, u^*) étant hyperbolique, il existe donc un homéomorphisme entre le système non-linéaire et le système linéarisé.

Analysons à présent le positionnement des pôles et des zéros du système linéarisé. Les figures 3.31, 3.32, 3.33 représentent la répartition des pôles et des zéros dans le plan complexe. On constate que l'ensemble des pôles est situé sur l'axe des réels et à gauche du plan complexe (c'est-à-dire qu'ils ont une partie réelle strictement négative), ce qui confirme bien la stabilité du système. Sur la figure 3.32, on observe deux catégories de pôles. Il y a un pôle rapide situé à environ -660

qui est d'ailleurs "annulé" par un zéro. Tandis que le reste des pôles est situé entre -1 et 0 et ont donc une dynamique plus lente. Le pôle dominant vaut $p = -0,005$. Concernant les zéros du système, on remarque sur la figure 3.31 qu'il y a un zéro "instable"² qui vaut $2,36 \cdot 10^5$. Le système est donc à non minimum de phase. Cependant, si l'on observe la réponse indicielle du système linéarisé (voir figure 3.34), on ne constate pas que le système est à non minimum de phase. Ceci est dû au fait que le zéro est fortement positif, il s'agit donc d'un zéro très rapide et son influence sur la dynamique du système n'est pas perceptible. Tous les autres zéros du système sont stables (c'est-à-dire avec une partie réelle strictement négative).

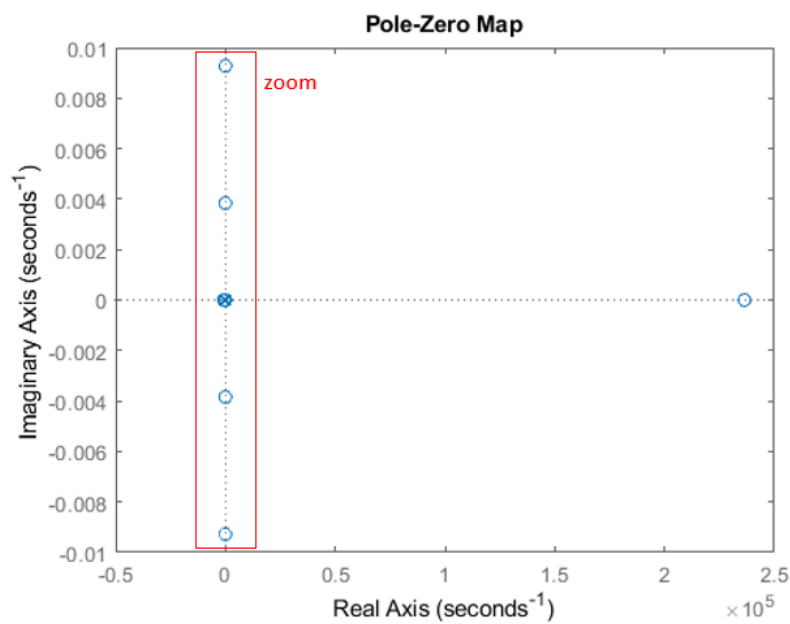


FIGURE 3.31 – Pôles et zéros du système linéarisé. × pôles ; o zéros

2. Remarque : en réalité un zéro instable ne cause pas d'instabilité du système. On parle ici de zéro instable pour dire que sa partie réelle est positive

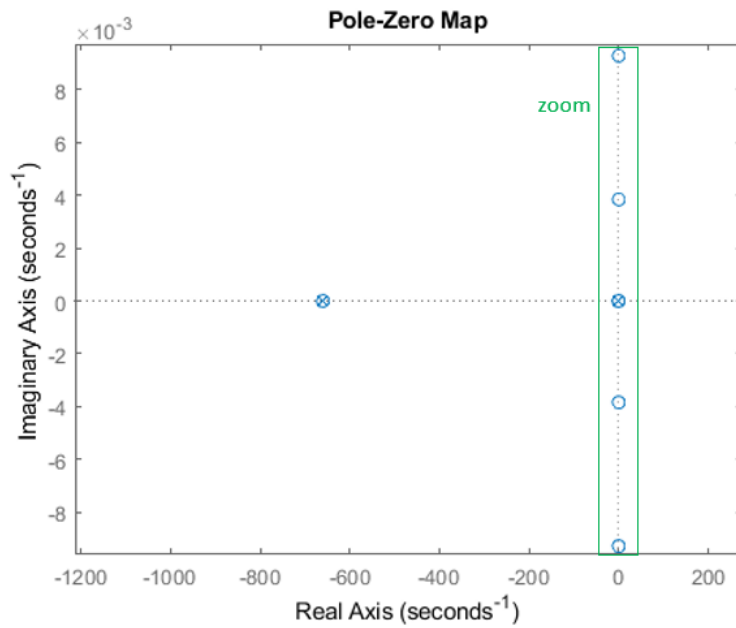


FIGURE 3.32 – Pôles et zéros du système linéarisé. Zoom de la figure 3.31. × pôles ;
○ zéros

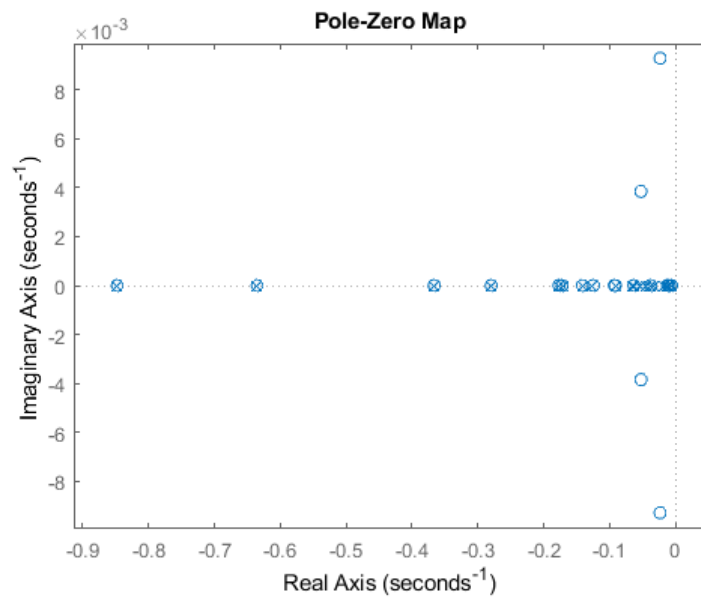


FIGURE 3.33 – Pôles et zéros du système linéarisé. Zoom de la figure 3.32. × pôles ;
○ zéros

La figure 3.34 montre la réponse indicielle du système non linéaire et du système linéarisé en boucle ouverte. On remarque que le système linéarisé colle assez bien au vrai système tant que l'on reste dans un voisinage proche de l'équilibre, mais on observe tout de même qu'il y a une petite erreur statique entre les deux. Le temps de réponse du système est d'environ 1500 secondes.

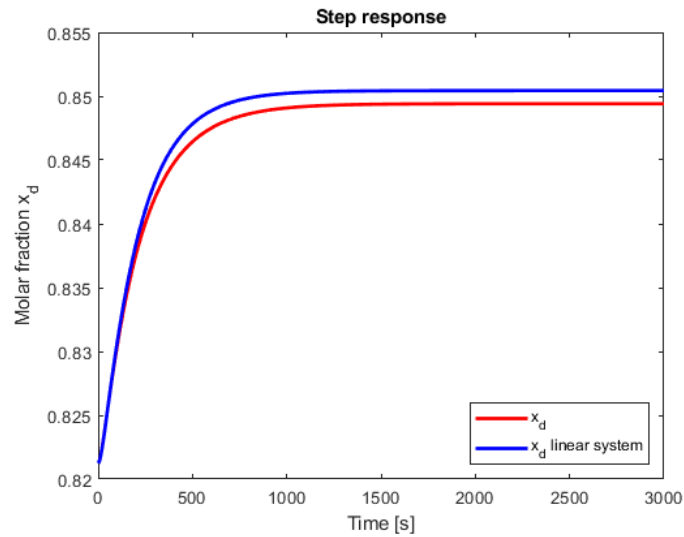


FIGURE 3.34 – Réponse indicielle du système non linéaire et du système linéarisé en boucle ouverte

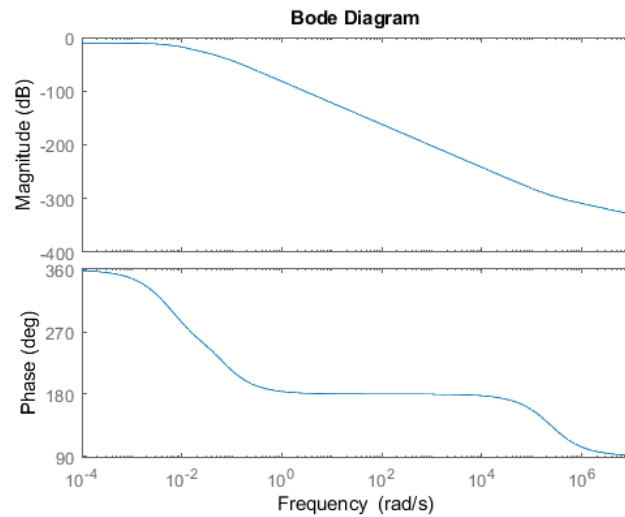


FIGURE 3.35 – Diagramme de Bode du système linéarisé

Contrôlabilité

Pour analyser la contrôlabilité du système, on doit calculer la matrice de contrôlabilité

$$C = [B \quad AB \quad A^2B \quad \dots \quad A^{2N+3}B] \quad (3.38)$$

et ensuite calculer son rang. Si son rang est égal à $2(N+2)$ (nombre de variables d'état), alors le système est contrôlable.

Cependant, le calcul du rang de cette matrice est mal conditionné. En effet, le calcul du rang est très sensible aux erreurs d'arrondi de la machine et dans notre cas, cette méthode ne fonctionne pas. Une solution pour résoudre ce problème est de calculer la matrice de contrôlabilité sous sa forme échelonnée afin de faire apparaître les modes contrôlables et les modes non-contrôlables. On calcule cette nouvelle matrice de la manière suivante :

$$\bar{A} = TAT^T = \begin{bmatrix} A_{nc} & 0 \\ A_{21} & A_c \end{bmatrix} \quad (3.39)$$

$$\bar{B} = TB = \begin{bmatrix} 0 \\ B_c \end{bmatrix} \quad (3.40)$$

$$\bar{C} = CT^T = [C_{nc} \quad C_c] \quad (3.41)$$

où la matrice T est unitaire et (A_c, B_c) est contrôlable.

En appliquant cette méthode, on trouve finalement que A_c a la même dimension que la matrice A . On peut donc conclure que le système linéarisé est contrôlable. Cependant, il faut rester prudent concernant le système non linéaire. En effet, ce n'est pas parce que le système linéarisé est contrôlable que cela implique nécessairement que le système non linéaire le soit également. Pour pouvoir conclure de la contrôlabilité du système non linéaire, il faudrait faire une analyse plus complète qui fait appel à de la géométrie différentielle et au crochet de Lie afin de calculer ce qu'on appelle le rang d'atteignabilité du système. Cette analyse étant beaucoup plus complexe, elle ne sera pas faite dans le cadre de ce mémoire.

Néanmoins, on peut tenter de répondre intuitivement à la question de la contrôlabilité du système non linéaire. Intuitivement, on aurait plutôt tendance à dire que le système n'est pas complètement atteignable et donc pas contrôlable. En effet, si l'on prend comme exemple le cas extrême où l'on souhaite avoir 1% de distillat en sortie de la colonne ($x_D = 0,01$), il semble très compliqué d'atteindre cet état uniquement en jouant avec la valeur du ratio de reflux R . Bien évidemment,

ceci n'est en aucun cas une preuve mathématique, mais simplement une piste de réflexion.

Observabilité

Pour analyser l'observabilité du système, on doit calculer la matrice d'observabilité

$$\mathcal{O} = \begin{bmatrix} C \\ CA \\ CA^2 \\ \vdots \\ CA^{2N+3} \end{bmatrix} \quad (3.42)$$

et ensuite calculer son rang. Si son rang est égal à $2(N+2)$ (nombre de variables d'état), alors le système est observable.

Cependant, pour les mêmes raisons que pour la contrôlabilité, le calcul du rang est difficile car mal conditionné. On va donc procéder de manière analogue en construisant la matrice sous sa forme échelonnée afin de faire apparaître les modes observables et les modes non-observables. La méthode de calcul est la suivante :

$$\bar{A} = UAU^T = \begin{bmatrix} A_{no} & A_{12} \\ A_0 & A_0 \end{bmatrix} \quad (3.43)$$

$$\bar{B} = UB = \begin{bmatrix} B_{no} \\ B_o \end{bmatrix} \quad (3.44)$$

$$\bar{C} = CU^T = \begin{bmatrix} 0 & C_o \end{bmatrix} \quad (3.45)$$

où la matrice U est unitaire et (A_o, C_o) est observable.

En appliquant cette méthode, on trouve finalement que A_o a la même dimension que la matrice A . On peut donc conclure que le système linéarisé est observable. Cependant, tout comme pour la contrôlabilité, on ne peut pas conclure de l'observabilité du système non linéaire en se basant sur l'analyse du système linéarisé.

3.3.5 Améliorations

Il y a plusieurs améliorations qui peuvent être apportées à ce deuxième modèle. Pour l'instant, le souci majeur de ce modèle est le problème de puissance du boiler. En effet, comme expliqué dans la section 3.3.2, la puissance du boiler dans la simulation est 100 fois inférieure à la réalité. Une des pistes d'amélioration serait de

prendre en compte les pertes de chaleur avec l'environnement dans les équations du modèle.

Concernant le contrôle de la colonne, nous avons utilisé un contrôleur PI avec un mécanisme d'anti emballement. Ce type de contrôleur est assez basique, mais fonctionne relativement bien. Cependant, on pourrait améliorer le contrôle du système en utilisant un contrôleur plus avancé. Nous avons d'ailleurs travaillé sur un contrôleur de Lyapunov, mais malheureusement cela n'a pas abouti. La difficulté pour ce type de contrôleur est de trouver une fonction de Lyapunov du système. Il n'existe aucune méthodologie ou algorithme qui permettent de trouver ce genre de fonctions. En général, l'énergie et les fonctions quadratiques sont de bons candidats de fonction de Lyapunov. Ce genre de contrôleur est par exemple très efficace pour contrôler un double pendule. N'ayant pas réussi à trouver une fonction de Lyapunov du système, nous n'avons donc pas pu implémenter ce contrôleur. Néanmoins, on pourrait très bien envisager d'utiliser un autre contrôleur avancé comme par exemple un MPC (*Model Predictive Control*). Il s'agit d'ailleurs du choix qui a été fait par les chercheurs de l'université de Bratislava [3],[4],[5].

Pour la partie analyse, on pourrait pousser plus loin l'analyse de la contrôlabilité du système non linéaire comme expliqué dans la section 3.3.4.

Chapitre 4

Conclusion

La distillation est un procédé permettant de séparer les différents constituants d'un mélange homogène. Les enjeux énergétiques et économiques de la distillation sont très importants dans le domaine industriel. Il est donc primordial de bien comprendre la dynamique du système afin de mieux le contrôler. Ce travail a permis d'expliquer le fonctionnement d'une colonne de distillation et de présenter les différents types de colonnes. Les différents aspects techniques nécessaires à l'installation d'une colonne de laboratoire ont été abordés notamment via le dimensionnement de la quantité d'eau nécessaire au bon fonctionnement du condenseur. Nous nous sommes ensuite intéressés à la simulation et la modélisation de la colonne UOP3CC de Armfield afin de séparer un mélange eau-méthanol. Dans un premier temps, une simulation du système à l'état d'équilibre a été réalisée via le logiciel Aspen qui est couramment utilisé par les ingénieurs et les chimistes pour simuler des procédés industriels. Nous avons ensuite développé un premier modèle permettant de simuler la dynamique du système. Cependant, ce premier modèle ne tient pas compte de manière explicite de l'évolution de la température dans la colonne. C'est la raison pour laquelle un deuxième modèle a été développé pour modéliser l'évolution de la température grâce à un bilan d'énergie. Les résultats de ce nouveau modèle ont permis de mettre en évidence un problème de puissance du boiler dans la modélisation. Nous avons ensuite utilisé un contrôleur PI (proportionnel integral) couplé avec un mécanisme d'anti emballement afin d'éviter la saturation de la commande dans le but de contrôler la concentration du distillat en sortie de la colonne. Nous avons également étudié le modèle en analysant la stabilité, la contrôlabilité et l'observabilité du système. Et finalement, nous avons discuté des différents points d'amélioration qui pouvaient être apportés à ce travail.

Bibliographie

- [1] WIKIPEDIA CONTRIBUTORS. *Distillation* — *Wikipedia, The Free Encyclopedia*. [Online ; accessed 07-December-2021]. 2021. URL : <https://fr.wikipedia.org/wiki/Distillation>.
- [2] WIKIPEDIA CONTRIBUTORS. *Azéotrope* — *Wikipedia, The Free Encyclopedia*. [Online ; accessed 07-December-2021]. 2021. URL : <https://fr.wikipedia.org/wiki/Az%C3%A9otrope>.
- [3] Martin KLAUČO et al. “Identification and Control of a Laboratory Distillation Column”. In : *International Conference Cybernetics and Informatics*. Fév. 2014.
- [4] Ján DRGOŇA et al. “Model identification and predictive control of a laboratory binary distillation column”. In : *2015 20th International Conference on Process Control (PC)*. 2015, p. 357-362. DOI : 10.1109/PC.2015.7169989.
- [5] Ján DRGOŇA et al. “Optimal control of a laboratory binary distillation column via regionless explicit MPC”. In : *Computers Chemical Engineering* 96 (2017), p. 139-148. ISSN : 0098-1354. DOI : <https://doi.org/10.1016/j.compchemeng.2016.10.003>. URL : <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0098135416303192>.
- [6] ARMFIELD. *UOP3 - Distillation Columns*. 2021. URL : <https://armfield.co.uk/product/uop3-distillation-columns/>.
- [7] ATEX. *Zones ATEX*. 2021. URL : <https://zone-atex.fr/page/zones-atex.html>.
- [8] ARMFIELD. *Instruction manual UOP3CC - Continuous Distillation Column*. Sept. 2007.
- [9] William L. LUYBEN et Cheng-Ching YU. *Reactive Distillation Design and Control*. John Wiley Sons, 2008.

- [10] Syed A. TAQVI, Lemma Dendena TUFA et Shuhaimi MUHADIZIR. “Optimization and Dynamics of Distillation Column Using Aspen Plus®”. In : *Procedia Engineering* 148 (2016). Proceeding of 4th International Conference on Process Engineering and Advanced Materials (ICPEAM 2016), p. 978-984. ISSN : 1877-7058. DOI : <https://doi.org/10.1016/j.proeng.2016.06.484>. URL : <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1877705816309511>.
- [11] Vu Trieu MINH. “Modeling and control of distillation column in a petroleum process”. In : *2010 5th IEEE Conference on Industrial Electronics and Applications*. 2010, p. 259-263. DOI : 10.1109/ICIEA.2010.5516816.
- [12] Miklós István SZÁVULY et al. “From modeling to virtual laboratory development of a continuous binary distillation column for engineering education using MATLAB and LabVIEW”. In : *Computer Applications in Engineering Education* 27.5 (2019), p. 1019-1029. DOI : <https://doi.org/10.1002/cae.22119>. URL : <https://onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1002/cae.22119>.
- [13] H. S. TRUONG, I. ISMAIL et R. RAZALI. “Fundamental modeling and simulation of a binary continuous distillation column”. In : *2010 International Conference on Intelligent and Advanced Systems*. 2010, p. 1-5. DOI : 10.1109/ICIAS.2010.5716218.
- [14] Inc. THE MATHWORKS. *interp1*. Natick, Massachusetts, United State, 2021. URL : <https://nl.mathworks.com/help/matlab/ref/interp1.html>.

Annexes

Code Matlab : premier modèle

```
1 %% Simulation of a binary distillation V3 – Antoine Tuerlinckx
2
3 close all;
4 clear all;
5
6 %% set global variables
7
8 global vap_liq_eq; % vapor liquid equilibrium
9 global N; % total number of stages
10 global nf; % feed stage
11
12 global xf; % liquid composition of the distillate in the feed
13 global yf; % vapor composition of the distillate in the feed
14 global zf; % molar fraction of the distillate in the feed
15
16 global xb; % liquid molar fraction of the distillate at the bottom
17 global xd; % liquid molar fraction of the distillate at the top
18
19 global Mt; % molar hold-up on each tray
20 global Md; % distillate molar hold-up
21 global Mb; % bottoms molar hold-up
22
23 global F; % molar flow rate of the feed
24 global Vf; % molar flow rate from the feed of the vapor
25 global Lf; % liquid flow rate from the feed
26
27
28 %% Model parameters
29
30 xf = 0.3; % liquid composition of methanol in the feed
31 Tf = 273.15+75; % K temperature of the feed
32 Tb = 273.15+90; % K temperature at the bottom
33
34 % column dimensions
35
```

```

36 N = 9; % number of trays
37 nf = 5; % feed tray
38
39 Dk = 0.05; % m diameter of the column
40 ht = 0.005; % m average depth of clear liquid on a tray
41
42 Vol_b = 0.02; % m^3 reboiler capacity
43
44
45 % material properties
46 % molar mass
47 MCH3OH = 32.0419*10^(-3); % kg/mol methanol
48 MH2O = 18.0153*10^(-3); % kg/mol water
49
50 % specific heat
51 CpCH3OH = 79.5; % J/(mol*K) methanol
52 CpH2O = 75.291; % J/(mol*K) water
53
54 % heat of vaporization
55 deltaH_CH3OH = 35200; % J/mol methanol at T=64.7 C
56 deltaH_H2O = 40660; % J/mol water at T=100 C
57
58 % density
59 rhoCH3OH = 791.1; % kg/m^3 density of the methanol at T=20 C and
60 p=1 bar
61 rhoCH3OH_d = 748.6; % kg/m^3 density of the methanol at T=64.15 C
62 and p=1 bar
63 rhoCH3OH_t = 730; % kg/m^3 density of the methanol at T=75 C and
64 p=1 bar A VERIFIER
65 rhoCH3OH_b = 720; % kg/m^3 density of the methanol at T=90 C and
66 p=1 bar A VERIFIER
67
68 rhoH2O = 998.1; % kg/m^3 density of water at T=20 C and p=1 bar
69 rhoH2O_d = 980.99; % kg/m^3 density of water at T=64.15 C and p=1
70 bar
71 rhoH2O_t = 974.86; % kg/m^3 density of water at T=75 C and p=1
72 bar
73 rhoH2O_b = 965.31; % kg/m^3 density of water at T=90 C and p=1
74 bar
75
76 Mw_b = 0.05*MCH3OH + 0.95*MH2O; % kg/mol molar weight at the
77 bottom
78 wCH3OH_b = (0.05*MCH3OH)/(Mw_b); % mass fraction of methanol at
79 the bottom
80 wH2O_b = (0.95*MH2O)/(Mw_b); % mass fraction of water at the
81 bottom
82
83 Mw_t = 0.3*MCH3OH + 0.7*MH2O; % kg/mol mean molar weight on a
84 tray A VERIFIER (1a composition

```

```

74     moyenne)
wCH3OH_t = (0.3*MCH3OH)/(Mw_t); % mean mass fraction of methanol
    on a tray A VERIFIER (la composition moyenne)
75 wH2O_t = (0.7*MH2O)/(Mw_t); % mean mass fraction of methanol on a
    tray A VERIFIER (la composition moyenne)
76
77 Mw_f = xf*MCH3OH + (1-xf)*MH2O; % kg/mol molar weight of the feed
78 wCH3OH_f = (xf*MCH3OH)/(xf*MCH3OH + (1-xf)*MH2O); % mass fraction
    of methanol in the feed
79 wH2O_f = ((1-xf)*MH2O)/(xf*MCH3OH + (1-xf)*MH2O); % mass fraction
    of water in the feed
80
81 rho_b = 1/((wCH3OH_b/rhoCH3OH_b) + (wH2O_b/rhoH2O_b)); % kg/m^3
    density of the bottom product
82 rho_t = 1/((wCH3OH_t/rhoCH3OH_t) + (wH2O_t/rhoH2O_t)); % kg/m^3
    mean density of the liquid holdup on a tray
83 rho_f = 1/((wCH3OH_f/rhoCH3OH_t) + (wH2O_f/rhoH2O_t)); % kg/m^3
    density of the feed
84
85
86 % molar hold-up
87
88 %{
89 Mt = 0.95*pi*((Dk^2)/4) * (rho_t/Mw_t); % mol mean molar hold-up
    on a tray
90 Mb = Vol_b*(rho_b/Mw_b); % mol molar hold-up at the bottom
91 Md = 50; % mol distillate molar hold-up
92 %}
93
94 %Mt = 0.95*pi*((Dk^2)/4) * (rho_t/Mw_t); % mol mean molar hold-up
    on a tray
95
96
97 Mt = 0.5;
98 Mb = Mt/5; % mol molar hold-up at the bottom
99 Md = Mt/2; % mol distillate molar hold-up
100
101
102
103 % relative volatility
104 table_vap_liq_eq = [369.65 0.00840 0.10300;
105                      365.45 0.02580 0.22700;
106                      360.65 0.06800 0.39100;
107                      353.25 0.13700 0.56800;
108                      349.05 0.24000 0.68000;
109                      343.75 0.48000 0.79000;
110                      341.85 0.57200 0.82000;
111                      339.55 0.74100 0.90600]; % at p=97.99 kPa,
    source: http://www.ddbst.com/en/EED/VLE/

```

VLE%20Methanol%3BWater.php

```

112
113 vap_liq_eq = [64.5 1 1;
114               65.0 0.979 0.950;
115               66.0 0.958 0.900;
116               67.5 0.915 0.800;
117               69.3 0.870 0.700;
118               71.2 0.825 0.600;
119               73.1 0.779 0.500;
120               75.3 0.729 0.400;
121               78.0 0.665 0.300;
122               81.7 0.579 0.200;
123               84.4 0.517 0.150;
124               87.7 0.418 0.100;
125               89.3 0.365 0.080;
126               91.2 0.304 0.060;
127               93.5 0.230 0.040;
128               96.4 0.134 0.020;
129               100 0 0]; % at p=101.3 kPa, source: data of
                        J.G. Dunlop, M.S. thesis, Brooklyn Polytechnic
                        Institute (1948)
130
131 vap_liq_eq = flip(vap_liq_eq,1);
132 len_T = size(vap_liq_eq,1);
133 alpha_T = zeros(len_T,2); % relative volatility depending of
                        temperature at p = 101.3 kPa
134
135 for i=1:len_T
136     y_i = vap_liq_eq(i,2);
137     x_i = vap_liq_eq(i,3);
138     alpha_T(i,1) = vap_liq_eq(i,1);
139     alpha_T(i,2) = (y_i/x_i)*((1-x_i)/(1-y_i));
140 end
141
142 linear_fit_alpha = polyfit(alpha_T(2:end-1,1),alpha_T(2:end-1,2)
                        ,1); % alpha = a + b*T
143 a = linear_fit_alpha(2);
144 b = linear_fit_alpha(1);
145
146 Temp = linspace(64.5,100,1000);
147 alpha_lin_mod = a+b*Temp;
148
149 alpha_f = interp1(alpha_T(2:end-1,1),alpha_T(2:end-1,2),75,'
                        spline'); % relative volatility of the feed at Tf=75 C
150
151 x_T = linspace(0,1,1000);
152 y_T = alpha_f*x_T./(1+(alpha_f-1)*x_T);
153
154 y_T_lin = zeros(1,len_T);

```

```

155     for i=1:len_T
156         T_i = vap_liq_eq(i,1);
157         x_i = vap_liq_eq(i,3);
158         alpha_lin = a+b*T_i;
159         y_T_lin(i) = alpha_lin*x_i/(1+(alpha_lin-1)*x_i);
160     end
161
162
163 % Flow rates
164
165 vf = (50*10^(-6))/60; % m^3/s feed rate
166 qf = vf*rho_f; % kg/s mass feed rate
167 F = qf/Mw_f; % mol/s flow rate of the feed
168 Lf = F; % mol/s liquid flow rate from the feed
169 Vf = 0; % mol/s vapor flow rate from the feed
170
171 yf = 0; % vapor composition of methanol in the feed
172 zf = xf; % molar fraction of the distillate in the feed
173
174 xb = 0.05; % liquid molar fraction of the distillate at the bottom
175 xd = 0.95; % liquid molar fraction of the distillate at the top
176
177
178 %% Simulation
179
180
181 tspan = [0 2000]; % s time
182 %x0 = zeros(N+2,1); % initial conditions
183 x0 = linspace(0.15,0.8,N+2)'; % initial conditions
184 %x0 = linspace(0.05,0.4,N+2)'; % initial conditions
185
186 [t,x] = ode45(@model_ODE,tspan,x0);
187 x = x';
188
189 len_t = length(t);
190 len_x = size(x,1);
191
192 y = zeros(len_x,len_t); % molar fraction of vapor of methanol on each
    tray
193 T = zeros(len_x,len_t); % C temperature on each tray
194
195 for i=1:len_x
196     y(i,:) = interp1(vap_liq_eq(:,3),vap_liq_eq(:,2),x(i,:), 'spline');
197     T(i,:) = interp1(vap_liq_eq(:,3),vap_liq_eq(:,1),x(i,:), 'spline');
198 end
199
200 R = reflux_ratio(t); % reflux ratio
201
202 %{

```

```

203 xB = x(1,:); % molar fraction of methanol at the bottom
204 xD = x(end,:); % molar fraction of methanol at the top
205
206 D = ((xB-zf)./(xB-xD)).*F;
207 B = ((zf-xD)./(xB-xD)).*F;
208 %}
209
210
211 %% Plots
212
213
214 figure
215 for i=1:len_x
216     hold on
217     plot(t,x(i,:), 'LineWidth',2)
218     title('Evolution of the molar fraction of methanol on each tray')
219     xlabel('Time [s]')
220     ylabel('Molar fraction x_{i}')
221 end
222
223 figure
224 for i=1:len_x
225     hold on
226     plot(t,y(i,:), 'LineWidth',2)
227     title('Evolution of the molar fraction of vapor of methanol on
228           each tray')
229     xlabel('Time [s]')
230     ylabel('Molar fraction y_{i}')
231 end
232
233 figure
234 for i=1:len_x
235     hold on
236     plot(t,T(i,:), 'LineWidth',2)
237     title('Evolution of the temperature on each tray')
238     xlabel('Time [s]')
239     ylabel('Temperature [C]')
240 end
241
242 figure
243 plot(t,R, 'LineWidth',2)
244 axis([0 tspan(2) 0 3])
245 title('Evolution of the reflux ratio')
246 xlabel('Time [s]')
247 ylabel('Reflux ratio R')
248
249 figure
250 plot(vap_liq_eq(:,3),vap_liq_eq(:,2), 'b',x_T,y_T, 'r',vap_liq_eq(:,3),
251      y_T_lin, 'g', 'LineWidth',2)

```

```

250 title('Liquid-vapour equilibrium diagram of methanol-water solution
        at p=101.3 kPa')
251 xlabel('Molar fraction of liquid x [mol/mol]')
252 ylabel('Molar fraction of vapour y [mol/mol]')
253 legend('Real data','Approximation','Linear approximation','Location',
        'northwest')
254
255 figure
256 plot(alpha_T(:,1),alpha_T(:,2),'b',Temp,alpha_lin_mod,'r','LineWidth',
        2)
257 title('Relative volatility of methanol-water solution at p=101.3 kPa')
258 xlabel('Temperature T [C]')
259 ylabel('Relative volatility \alpha')
260 legend('Real data','Linear approximation','Location','northwest')

```

```

1 function xdot = model_ODE(t,x)
2
3 %% set global variables
4
5 global vap_liq_eq; % vapor liquid equilibrium
6 global N; % total number of stages
7 global nf; % feed stage
8
9 global xf; % liquid composition of the distillate in the feed
10 global yf; % vapor composition of the distillate in the feed
11 global zf; % molar fraction of the distillate in the feed
12
13 global xb; % liquid molar fraction of the distillate at the bottom
14 global xd; % liquid molar fraction of the distillate at the top
15
16 global Mt; % molar hold-up on each tray
17 global Md; % distillate molar hold-up
18 global Mb; % bottoms molar hold-up
19
20 global F; % molar flow rate of the feed
21 global Vf; % molar flow rate from the feed of the vapor
22 global Lf; % liquid flow rate from the feed
23
24
25 %% Equations
26
27
28 xdot = zeros(N+2,1);
29 y = interp1(vap_liq_eq(:,3),vap_liq_eq(:,2),x,'spline');
30
31 R = reflux_ratio(t); % reflux ratio
32
33

```

```

34 D = ((xb-zf)/(xb-xd))*F;
35 B = ((zf-xd)/(xb-xd))*F;
36 V = ((xb-zf)/(xb-xd))*F*(1+R)-Vf;
37 L = ((xb-zf)/(xb-xd))*F*R;
38
39
40 %{
41 D = ((x(1)-zf)/(x(1)-x(N+2)))*F;
42 B = ((zf-x(N+2))/(x(1)-x(N+2)))*F;
43 V = ((x(1)-zf)/(x(1)-x(N+2)))*F*(1+R)-Vf;
44 L = ((x(1)-zf)/(x(1)-x(N+2)))*F*R;
45 %}
46
47 % Reboiler
48 xdot(1)=(1/Mb)*((L+Lf)*x(2) - V*y(1) - B*x(1));
49
50 % Tray for i=2 to nf-1
51 for i=2:nf-1
52     xdot(i)=(1/Mt)*(V*(y(i-1)-y(i)) + (L+Lf)*(x(i+1)-x(i)));
53 end
54
55 % Tray below the feed flow (i=nf)
56 xdot(nf)=(1/Mt)*(V*(y(nf-1)-y(nf)) + L*(x(nf+1)-x(nf)) + Lf*(xf-x(nf)
    ));
57
58 % Tray above the feed flow (i=nf+1)
59 xdot(nf+1)=(1/Mt)*(V*(y(nf)-y(nf+1)) + Vf*(yf-y(nf+1)) + L*(x(nf+2)-x
    (nf+1)));
60
61 % Tray for i=nf+2 to N+1
62 for i=nf+2:N+1
63     xdot(i)=(1/Mt)*((V+Vf)*(y(i-1)-y(i)) + L*(x(i+1)-x(i)));
64 end
65
66 % Condenser
67 xdot(N+2)=(1/Md)*((V+Vf)*y(N+1) - L*x(N+2) - D*x(N+2));
68
69 end

```

```

1 function R = reflux_ratio(t)
2
3 len_t = length(t);
4 R = zeros(len_t,1);
5
6 for i=1:len_t
7     if (t(i) < 300)
8         R(i) = 1;
9     else
10        R(i) = 2.5;

```

```

11     end
12 end
13
14 end

```

Code Matlab : deuxième modèle

```

1
2 %% Simulation of a binary distillation V5 - Antoine Tuerlinckx
3
4 close all;
5 clear all;
6
7
8 %% set global variables
9
10
11 global a b; % coefficients of the relative volatility:  $\alpha = a + b \cdot T$ 
12 global N; % total number of stages
13 global nf; % feed stage
14
15 global CpCH3OH CpH2O; % molar heat capacity
16 global deltaHof_CH3OH deltaHof_H2O; % standard enthalpy of formation
17 global Tf; % feed temperature
18 global Td; % temperature at the top
19
20 global xf; % liquid composition of the distillate in the feed
21 global yf; % vapor composition of the distillate in the feed
22 global zf; % molar fraction of the distillate in the feed
23
24 global xb; % liquid molar fraction of the distillate at the bottom
25 global xd; % liquid molar fraction of the distillate at the top
26
27 global Mt; % molar hold-up on each tray
28 global Md; % distillate molar hold-up
29 global Mb; % bottoms molar hold-up
30
31 global F; % molar flow rate of the feed
32 global Vf; % molar flow rate from the feed of the vapor
33 global Lf; % liquid flow rate from the feed
34
35
36 %% Model parameters
37
38

```

```

39 xf = 0.3; % liquid composition of methanol in the feed
40 Tf = 273.15+75; % K temperature of the feed
41 Td = 273.15+64.5; % K temperature at the top
42 Tb = 273.15+90; % K temperature at the bottom
43
44 % column dimensions
45
46 N = 9; % number of trays
47 nf = 5; % feed tray
48
49 Dk = 0.05; % m diameter of the column
50 ht = 0.005; % m average depth of clear liquid on a tray
51
52 Vol_b = 0.02; % m^3 reboiler capacity
53
54
55 % material properties
56     % molar mass
57     MCH3OH = 32.0419*10(-3); % kg/mol methanol
58     MH2O = 18.0153*10(-3); % kg/mol water
59
60     % specific heat
61     CpCH3OH = 79.5; % J/(mol*K) methanol
62     CpH2O = 75.291; % J/(mol*K) water
63
64     % standard enthalpy of formation
65     deltaH0f_CH3OH = -238.4*10(-3); % J/mol standard enthalpy of
        formation of methanol at T=25 C
66     deltaH0f_H2O = -285.8*10(-3); % J/mol standard enthalpy of
        formation of water at T=25 C
67
68     % heat of vaporization
69     deltaHvap_CH3OH = 35200; % J/mol methanol at T=64.7 C
70     deltaHvap_H2O = 40660; % J/mol water at T=100 C
71
72     % density
73     rhoCH3OH = 791.1; % kg/m(-3) density of the methanol at T=20 C and
        p=1 bar
74     rhoCH3OH_d = 748.6; % kg/m(-3) density of the methanol at T=64.15 C
        and p=1 bar
75     rhoCH3OH_t = 730; % kg/m(-3) density of the methanol at T=75 C and
        p=1 bar    A VERIFIER
76     rhoCH3OH_b = 720; % kg/m(-3) density of the methanol at T=90 C and
        p=1 bar    A VERIFIER
77
78     rhoH2O = 998.1; % kg/m(-3) density of water at T=20 C and p=1 bar
79     rhoH2O_d = 980.99; % kg/m(-3) density of water at T=64.15 C and p=1
        bar

```

```

80 rhoH2O_t = 974.86; % kg/m^3 density of water at T=75 C and p=1
      bar
81 rhoH2O_b = 965.31; % kg/m^3 density of water at T=90 C and p=1
      bar
82
83 Mw_b = 0.05*MCH3OH + 0.95*MH2O; % kg/mol molar weight at the
      bottom
84 wCH3OH_b = (0.05*MCH3OH)/(Mw_b); % mass fraction of methanol at
      the bottom
85 wH2O_b = (0.95*MH2O)/(Mw_b); % mass fraction of water at the
      bottom
86
87 Mw_t = 0.3*MCH3OH + 0.7*MH2O; % kg/mol mean molar weight on a
      tray A VERIFIER (la composition
      moyenne)
88 wCH3OH_t = (0.3*MCH3OH)/(Mw_t); % mean mass fraction of methanol
      on a tray A VERIFIER (la composition moyenne)
89 wH2O_t = (0.7*MH2O)/(Mw_t); % mean mass fraction of methanol on a
      tray A VERIFIER (la composition moyenne)
90
91 Mw_f = xf*MCH3OH + (1-xf)*MH2O; % kg/mol molar weight of the feed
92 wCH3OH_f = (xf*MCH3OH)/(xf*MCH3OH + (1-xf)*MH2O); % mass fraction
      of methanol in the feed
93 wH2O_f = ((1-xf)*MH2O)/(xf*MCH3OH + (1-xf)*MH2O); % mass fraction
      of water in the feed
94
95 rho_b = 1/((wCH3OH_b/rhoCH3OH_b) + (wH2O_b/rhoH2O_b)); % kg/m^3
      density of the bottom product
96 rho_t = 1/((wCH3OH_t/rhoCH3OH_t) + (wH2O_t/rhoH2O_t)); % kg/m^3
      mean density of the liquid holdup on a tray
97 rho_f = 1/((wCH3OH_f/rhoCH3OH_t) + (wH2O_f/rhoH2O_t)); % kg/m^3
      density of the feed
98
99
100 % molar hold-up
101
102 %{
103 Mt = 0.95*pi*((Dk^2)/4) * (rho_t/Mw_t); % mol mean molar hold-up
      on a tray
104 Mb = Vol_b*(rho_b/Mw_b); % mol molar hold-up at the bottom
105 Md = 50; % mol distillate molar hold-up
106 %}
107
108
109 %Mt = 0.95*pi*((Dk^2)/4) * (rho_t/Mw_t); % mol mean molar hold-up
      on a tray
110
111
112 Mt = 0.5;

```

```

113 Mb = Mt/5; % mol molar hold-up at the bottom
114 Md = Mt/2; % mol distillate molar hold-up
115
116
117 % relative volatility
118 table_vap_liq_eq = [369.65 0.00840 0.10300;
119                    365.45 0.02580 0.22700;
120                    360.65 0.06800 0.39100;
121                    353.25 0.13700 0.56800;
122                    349.05 0.24000 0.68000;
123                    343.75 0.48000 0.79000;
124                    341.85 0.57200 0.82000;
125                    339.55 0.74100 0.90600]; % at p=97.99 kPa,
                                         source: http://www.ddbst.com/en/EED/VLE/
                                         VLE%20Methanol%3BWater.php
126
127 vap_liq_eq = [64.5 1 1;
128              65.0 0.979 0.950;
129              66.0 0.958 0.900;
130              67.5 0.915 0.800;
131              69.3 0.870 0.700;
132              71.2 0.825 0.600;
133              73.1 0.779 0.500;
134              75.3 0.729 0.400;
135              78.0 0.665 0.300;
136              81.7 0.579 0.200;
137              84.4 0.517 0.150;
138              87.7 0.418 0.100;
139              89.3 0.365 0.080;
140              91.2 0.304 0.060;
141              93.5 0.230 0.040;
142              96.4 0.134 0.020;
143              100 0 0]; % at p=101.3 kPa, source: data of
                                         J.G. Dunlop, M.S. thesis, Brooklyn Polytechnic
                                         Institute (1948)
144
145 vap_liq_eq = flip(vap_liq_eq,1);
146 len_T = size(vap_liq_eq,1);
147 alpha_T = zeros(len_T,2); % relative volatility depending of
                                         temperature at p = 101.3 kPa
148
149 for i=1:len_T
150     y_i = vap_liq_eq(i,2);
151     x_i = vap_liq_eq(i,3);
152     alpha_T(i,1) = vap_liq_eq(i,1)+273.15;
153     alpha_T(i,2) = (y_i/x_i)*((1-x_i)/(1-y_i));
154 end
155

```

```

156     linear_fit_alpha = polyfit(alpha_T(2:end-1,1),alpha_T(2:end-1,2)
157         ,1); % alpha = a + b*T
157     a = linear_fit_alpha(2);
158     b = linear_fit_alpha(1);
159
160     Temp = linspace(64.5,100,1000)+273.15;
161     alpha_lin_mod = a+b*Temp;
162
163     alpha_f = interp1(alpha_T(2:end-1,1),alpha_T(2:end-1,2)
164         ,75+273.15,'spline'); % relative volatility of the feed at Tf
165         =75 C
164
165     x_T = linspace(0,1,1000);
166     y_T = alpha_f*x_T./(1+(alpha_f-1)*x_T);
167
168     y_T_lin = zeros(1,len_T);
169     for i=1:len_T
170         T_i = vap_liq_eq(i,1)+273.15;
171         x_i = vap_liq_eq(i,3);
172         alpha_lin = a+b*T_i;
173         y_T_lin(i) = alpha_lin*x_i/(1+(alpha_lin-1)*x_i);
174     end
175
176
177 % Flow rates
178
179 vf = (50*10^(-6))/60; % m^3/s feed rate
180 qf = vf*rho_f; % kg/s mass feed rate
181 F = qf/Mw_f; % mol/s flow rate of the feed
182 Lf = F; % mol/s liquid flow rate from the feed
183 Vf = 0; % mol/s vapor flow rate from the feed
184
185 yf = 0; % vapor composition of methanol in the feed
186 zf = xf; % molar fraction of the distillate in the feed
187
188 xb = 0.05; % liquid molar fraction of the distillate at the bottom
189 xd = 0.95; % liquid molar fraction of the distillate at the top
190
191 %% Simulation
192
193
194
195 dt = 5; % s sampling time
196 t_end = 3000; % s total simulation time
197 t = 0:dt:t_end; % s time
198 len_t = length(t);
199 len_x = N+2;
200
201 load('initial_state.mat')% initial conditions

```

```

202 X = zeros(len_t,2*len_x);
203 R = zeros(len_t,1); % reflux ratio
204 R(1) = R0;
205 Q = ones(len_t,1)*Q0; % W heat reboiler
206
207 X(1,1:len_x) = x0;
208 X(1,len_x+1:end) = T0;
209 R(1) = R0;
210
211 X_PI = zeros(len_t,2*len_x);
212 R_PI = zeros(len_t,1); % reflux ratio
213 R_PI(1) = R0;
214
215 X_PI(1,1:len_x) = x0;
216 X_PI(1,len_x+1:end) = T0;
217
218 X_step = zeros(len_t,2*len_x);
219 X_step(1,1:len_x) = x0;
220 X_step(1,len_x+1:end) = T0;
221
222 [A,B,C] = linearization(x0,T0,R0,Q0);
223 sys = ss(A,B,C,0);
224
225 Co = ctrb(A,B);
226 Ob = obsv(A,C);
227
228 [~,~,~,~,k_ctrb] = ctrbf(A,B,C);
229 [~,~,~,~,k_obs] = obsvf(A,B,C);
230
231 % PI controller
232
233 r = zeros(len_t,1); % reference
234 e = zeros(len_t,1); % error
235 I = zeros(len_t,1); % integral of the error
236 u = zeros(len_t,1); % command u
237 y_out = zeros(len_t,1); % output of the system i.e. xd
238 y_out(1) = x0(end);
239
240 u(1) = R(1);
241
242 e_PI = zeros(len_t,1); % error
243 I_PI = zeros(len_t,1); % integral of the error
244 u_PI = zeros(len_t,1); % command u
245 y_out_PI = zeros(len_t,1); % output of the system i.e. xd
246 y_out_PI(1) = x0(end);
247
248 u_PI(1) = R_PI(1);
249
250 Kp = 35; % proportional term Kp

```

```

251 Ki = 0.1; % integral term Ki
252 Ks = 0.03; % anti-windup coefficient
253
254
255 for i=1:len_t
256     if (t(i) < 1500)
257         r(i) = 0.95;
258     else
259         r(i) = 0.80;
260     end
261 end
262
263
264
265 for i=1:len_t-1
266     disp(['t = ' num2str(t(i)) ' seconds'])
267
268     e(i+1) = r(i)-y_out(i);
269     I(i+1) = I(i) + (e(i+1)+e(i))*dt/2 + Ks*(R(i)-u(i))*dt;
270     u(i+1) = Kp*e(i+1) + Ki*I(i+1) + R0;
271     R(i+1) = max(u(i+1),0);
272
273     [~,Xdot] = ode15s(@(t,z)model_ODE(t,z,R(i+1),Q(i)),[0 dt],X(i,:))
274     ;
275     X(i+1,:) = Xdot(end,:);
276     y_out(i+1) = X(i+1,len_x);
277
278     e_PI(i+1) = r(i)-y_out_PI(i);
279     I_PI(i+1) = I_PI(i) + (e_PI(i+1)+e_PI(i))*dt/2;
280     u_PI(i+1) = Kp*e_PI(i+1) + Ki*I_PI(i+1) + R0;
281     R_PI(i+1) = max(u_PI(i+1),0);
282
283     [~,Xdot_PI] = ode15s(@(t,z)model_ODE(t,z,R_PI(i+1),Q(i)),[0 dt],
284     X_PI(i,:));
285     X_PI(i+1,:) = Xdot_PI(end,:);
286     y_out_PI(i+1) = X_PI(i+1,len_x);
287
288     [~,Xdot_step] = ode15s(@(t,z)model_ODE(t,z,R0+0.1,Q(i)),[0 dt],
289     X_step(i,:));
290     X_step(i+1,:) = Xdot_step(end,:);
291 end
292 %R(end) = R(end-1);
293
294 x_PI = X_PI(:,1:len_x);
295
296 x_lin = x0(end)+lsim(sys,R-R0,t);
297 x_step_lin = x0(end)+lsim(sys,0.1*ones(1,len_t),t);
298
299 x_step = X_step(:,len_x);

```

```

297
298 x = X(:,1:len_x);
299 T = X(:,len_x+1:end);
300
301 alpha = a+b*T; % relative volatility
302 y = alpha.*x./(1+(alpha-1).*x);
303
304 T = T-273.15;
305
306 T_est = zeros(len_t,len_x); %Temperature on each tray
307
308 for i=1:len_x
309     T_est(:,i)=interp1(vap_liq_eq(:,3),vap_liq_eq(:,1),x(:,i),'spline
310     ');
311 end
312
313 disp("sum k_ctrb = ")
314 disp(sum(k_ctrb))
315
316 disp("sum k_obs = ")
317 disp(sum(k_obs))
318
319 %{
320 x0 = X(end,1:len_x);
321 T0 = X(end,len_x+1:end);
322 R0 = R(end);
323 Q0 = Q(end);
324 save initial_state.mat x0 T0 R0 Q0
325 %}
326
327 %{
328 xB = x(1,:); % molar fraction of methanol at the bottom
329 xD = x(end,:); % molar fraction of methanol at the top
330
331 D = ((xB-zf)./(xB-xD)).*F;
332 B = ((zf-xD)./(xB-xD)).*F;
333 %}
334
335 %% Plots
336
337
338 figure
339 pzmap(sys);
340
341 figure
342 spy(A);
343 title('Sparsity pattern of A')
344

```

```

345 figure
346 bode(sys);
347
348 figure
349 for i=1:len_x
350     hold on
351     plot(t,x(:,i),'LineWidth',2)
352     title('Evolution of the molar fraction of methanol on each tray')
353     xlabel('Time [s]')
354     ylabel('Molar fraction x_{i}')
355 end
356
357 figure
358 for i=1:len_x
359     hold on
360     plot(t,y(:,i),'LineWidth',2)
361     title('Evolution of the molar fraction of vapor of methanol on
362           each tray')
363     xlabel('Time [s]')
364     ylabel('Molar fraction y_{i}')
365 end
366
367 figure
368 for i=1:len_x
369     hold on
370     plot(t,T(:,i),t,T_est(:,i),'—','LineWidth',2)
371     title('Evolution of the temperature on each tray')
372     xlabel('Time [s]')
373     ylabel('Temperature [C]')
374 end
375
376 figure
377 for i=1:len_x
378     hold on
379     plot(t,T(:,i),'LineWidth',2)
380     title('Evolution of the temperature on each tray')
381     xlabel('Time [s]')
382     ylabel('Temperature [C]')
383 end
384
385 figure
386 plot(t,R_PI,'b',t,R,'r','LineWidth',2)
387 title('Evolution of the reflux ratio')
388 grid on
389 axis([0 t(end) -1 6])
390 xlabel('Time [s]')
391 ylabel('Reflux ratio R')
392 legend('PI controller','PI + anti-windup','Location','northeast')

```

```

393 figure
394 plot(t,Q,'LineWidth',2)
395 title('Evolution of the heat of the reboiler')
396 xlabel('Time [s]')
397 ylabel('Heat reboiler Q [W]')
398
399
400 figure
401 plot(vap_liq_eq(:,3),vap_liq_eq(:,2),'b',x_T,y_T,'r',vap_liq_eq(:,3),
      y_T_lin,'g','LineWidth',2)
402 title('Liquid-vapour equilibrium diagram of methanol-water solution
      at p=101.3 kPa')
403 xlabel('Molar fraction of liquid x [mol/mol]')
404 ylabel('Molar fraction of vapour y [mol/mol]')
405 legend('Real data','\alpha constant','\alpha = a+bT','Location','
      northwest')
406
407 figure
408 plot(vap_liq_eq(:,3),vap_liq_eq(:,2),'b',x_T,y_T,'r','LineWidth',2)
409 title('Liquid-vapour equilibrium diagram of methanol-water solution
      at p=101.3 kPa')
410 xlabel('Molar fraction of liquid x [mol/mol]')
411 ylabel('Molar fraction of vapour y [mol/mol]')
412 legend('Real data','\alpha constant','Location','northwest')
413
414 figure
415 plot(alpha_T(:,1)-273.15,alpha_T(:,2),'b',Temp-273.15,alpha_lin_mod,'
      r','LineWidth',2)
416 title('Relative volatility of methanol-water solution at p=101.3 kPa')
417 xlabel('Temperature T [C]')
418 ylabel('Relative volatility \alpha')
419 legend('Real data','Linear approximation','Location','northwest')
420
421 figure
422 plot(vap_liq_eq(:,3),vap_liq_eq(:,1),'b',vap_liq_eq(:,2),vap_liq_eq
      (:,1),'r','LineWidth',2)
423 title('Liquid-vapour equilibrium diagram of methanol-water solution
      at p=101.3 kPa')
424 xlabel('Molar fraction x,y [-]')
425 ylabel('Temperature T [C]')
426 legend('x','y','Location','northeast')
427
428 figure
429 plot(t,r,'b',t,x(:,end),'r','LineWidth',2)
430 title('Evolution of the molar fraction of methanol at the top of the
      column')
431 xlabel('Time [s]')
432 ylabel('Molar fraction x_{d}')

```

```

433 legend('r','x_{d}','Location','southeast')
434
435 figure
436 plot(t,r,'b',t,x_PI(:,end),'m',t,x(:,end),'r',t,x_lin,'g','LineWidth',2)
437 title('Evolution of the molar fraction of methanol at the top of the
column')
438 xlabel('Time [s]')
439 ylabel('Molar fraction xd')
440 legend('r','xd with PI controller','xd with PI + anti-windup','xd
linear system','Location','southwest')
441
442 figure
443 plot(t,r,'b',t,x_PI(:,end),'g',t,x(:,end),'r','LineWidth',2)
444 title('Evolution of the molar fraction of methanol at the top of the
column')
445 xlabel('Time [s]')
446 ylabel('Molar fraction x_{d}')
447 legend('r','x_{d} with PI controller','x_{d} with PI + anti-windup','
Location','southwest')
448
449 figure
450 plot(t,x_step,'r',t,x_step_lin,'b','LineWidth',2)
451 title('Step response')
452 xlabel('Time [s]')
453 ylabel('Molar fraction x_{d}')
454 legend('x_{d}','x_{d} linear system','Location','southeast')

```

```

1 function zdot = model_ODE(t,z,R,Q)
2
3 %disp(['t = ' num2str(t) ' seconds'])
4
5 %% set global variables
6
7 global a b; % coefficients of the relative volatility: alpha = a + b*
T
8 global N; % total number of stages
9 global nf; % feed stage
10
11 global CpCH3OH CpH2O; % molar heat capacity
12 global deltaHof_CH3OH deltaHof_H2O; % standard enthalpy of formation
13 global Tf; % feed temperature
14 global Td; % temperature at the top
15
16 global xf; % liquid composition of the distillate in the feed
17 global yf; % vapor composition of the distillate in the feed
18 global zf; % molar fraction of the distillate in the feed
19
20 global xb; % liquid molar fraction of the distillate at the bottom

```

```

21 global xd; % liquid molar fraction of the distillate at the top
22
23 global Mt; % molar hold-up on each tray
24 global Md; % distillate molar hold-up
25 global Mb; % bottoms molar hold-up
26
27 global F; % molar flow rate of the feed
28 global Vf; % molar flow rate from the feed of the vapor
29 global Lf; % liquid flow rate from the feed
30
31
32 %% Variables
33
34 x = z(1:N+2); % liquid molar fraction of the distillate at each tray
35 T = z(N+3:end); % temperature at each tray
36
37 alpha = a+b*T; % relative volatility
38 y = alpha.*x./(1+(alpha-1).*x);
39
40 Cp_L = x.*CpCH3OH + (1-x).*CpH2O; % molar heat capacity of the liquid
    at each tray
41 Cp_V = y.*CpCH3OH + (1-y).*CpH2O; % molar heat capacity of the vapour
    at each tray
42
43 Cp_Lf = xf*CpCH3OH + (1-xf)*CpH2O; % molar heat capacity of the
    liquid of the feed
44 Cp_Vf = yf*CpCH3OH + (1-yf)*CpH2O; % molar heat capacity of the
    vapour of the feed
45
46
47 %% Equations
48
49
50 D = ((xb-zf)/(xb-xd))*F;
51 B = ((zf-xd)/(xb-xd))*F;
52 V = ((xb-zf)/(xb-xd))*F*(1+R)-Vf;
53 L = ((xb-zf)/(xb-xd))*F*R;
54
55
56 %{
57 D = ((x(1)-zf)/(x(1)-x(N+2)))*F;
58 B = ((zf-x(N+2))/(x(1)-x(N+2)))*F;
59 V = ((x(1)-zf)/(x(1)-x(N+2)))*F*(1+R)-Vf;
60 L = ((x(1)-zf)/(x(1)-x(N+2)))*F*R;
61 %}
62
63 dx = zeros(N+2,1);
64 dT = zeros(N+2,1);
65

```

```

66 % Reboiler
67 dx(1)=(1/Mb)*((L+Lf)*x(2) - V*y(1) - B*x(1));
68 %dT(1)=(1/(Mb*Cp_L(1)))*((L+Lf)*Cp_L(2)*(T(2)-T(1)) - V*Cp_V(1)*(T(1)
    -T(2)) - B*(Cp_L(1)*(T(1) -298.15) + x(1)*deltaH0f_CH3OH + (1-x(1))
    *deltaH0f_H2O) + Q);
69 dT(1)=(1/(Mb*Cp_L(1)))*((L+Lf)*Cp_L(2)*(T(2)-T(1)) - V*Cp_V(1)*(T(1)-
    T(2)) - B*Cp_L(1)*(T(1)-T(2)) + Q);
70
71 % Tray for i=2 to nf
72 for i=2:nf
73     dx(i)=(1/Mt)*(V*(y(i-1)-y(i)) + (L+Lf)*(x(i+1)-x(i)));
74     dT(i)=(1/(Mt*Cp_L(i)))*((L+Lf)*Cp_L(i+1)*(T(i+1)-T(i)) - (L+Lf)*
        Cp_L(i)*(T(i)-T(i-1)) + V*Cp_V(i-1)*(T(i-1)-T(i)) - V*Cp_V(i)
        *(T(i)-T(i+1)));
75 end
76
77
78 % Feeding tray (i=nf+1)
79 dx(nf+1)=(1/Mt)*(V*(y(nf)-y(nf+1)) + Vf*(yf-y(nf+1)) + L*x(nf+2) - (L
    +Lf)*x(nf+1) + Lf*xf);
80 dT(nf+1)=(1/(Mt*Cp_L(nf+1)))*(L*Cp_L(nf+2)*(T(nf+2)-T(nf+1)) - (L+Lf)
    *Cp_L(nf+1)*(T(nf+1)-T(nf)) + V*Cp_V(nf)*(T(nf)-T(nf+1)) - (V+Vf)*
    Cp_V(nf+1)*(T(nf+1)-T(nf+2)) + Lf*Cp_Lf*(Tf-T(nf+1)) + Vf*Cp_Vf*(
    Tf-T(nf+1)));
81
82 % Tray for i=nf+2 to N+1
83 for i=nf+2:N+1
84     dx(i)=(1/Mt)*((V+Vf)*(y(i-1)-y(i)) + L*(x(i+1)-x(i)));
85     dT(i)=(1/(Mt*Cp_L(i)))*(L*Cp_L(i+1)*(T(i+1)-T(i)) - L*Cp_L(i)*(T(
        i)-T(i-1)) + (V+Vf)*Cp_V(i-1)*(T(i-1)-T(i)) - (V+Vf)*Cp_V(i)*(
        T(i)-T(i+1)));
86 end
87
88 % Condenser
89 dx(N+2)=(1/Md)*((V+Vf)*y(N+1) - L*x(N+2) - D*x(N+2));
90 dT(N+2)=(1/Md*Cp_L(N+2))*((V+Vf)*Cp_V(N+1)*(T(N+1)-T(N+2)) - (L+D)*
    Cp_L(N+2)*(T(N+2)-Td));
91
92
93 zdot = zeros(2*(N+2),1);
94 zdot(1:N+2) = dx;
95 zdot(N+3:end) = dT;
96
97 end

```

```

1 function Q = heat_reboiler(t)
2
3 len_t = length(t);
4 Q = zeros(len_t,1);

```

```

5
6 for i=1:len_t
7     if (t(i) < 2000)
8         Q(i) = 10;
9     else
10        Q(i) = 15;
11    end
12 end
13
14 end

```

```

1 function [A,B_mat,C_mat] = linearization(x,T,R_eq,Q)
2
3 %% set global variables
4
5 global a b; % coefficients of the relative volatility: alpha = a + b*
   T
6 global N; % total number of stages
7 global nf; % feed stage
8
9 global CpCH3OH CpH2O; % molar heat capacity
10 global deltaH0f_CH3OH deltaH0f_H2O; % standard enthalpy of formation
11 global Tf; % feed temperature
12 global Td; % temperature at the top
13
14 global xf; % liquid composition of the distillate in the feed
15 global yf; % vapor composition of the distillate in the feed
16 global zf; % molar fraction of the distillate in the feed
17
18 global xb; % liquid molar fraction of the distillate at the bottom
19 global xd; % liquid molar fraction of the distillate at the top
20
21 global Mt; % molar hold-up on each tray
22 global Md; % distillate molar hold-up
23 global Mb; % bottoms molar hold-up
24
25 global F; % molar flow rate of the feed
26 global Vf; % molar flow rate from the feed of the vapor
27 global Lf; % liquid flow rate from the feed
28
29
30 %% Variables
31
32 syms x1 x2 x3
33 syms T1 T2 T3
34 syms y1(x1,T1) y2(x2,T2) y3(x3,T3)
35
36 y1(x1,T1) = (a+b*T1)*x1/(1+((a+b*T1)-1)*x1);
37 y2(x2,T2) = (a+b*T2)*x2/(1+((a+b*T2)-1)*x2);

```

```

38 | y3(x3, T3) = (a+b*T3)*x3/(1+((a+b*T3)-1)*x3);
39 |
40 | syms Cp_L1(x1) Cp_L2(x2) Cp_L3(x3)
41 | syms Cp_V1(x1, T1) Cp_V2(x2, T2) Cp_V3(x3, T3)
42 |
43 | Cp_L1(x1) = x1*CpCH3OH + (1-x1)*CpH2O; % molar heat capacity of the
    | liquid at each tray
44 | Cp_L2(x2) = x2*CpCH3OH + (1-x2)*CpH2O;
45 | Cp_L3(x3) = x3*CpCH3OH + (1-x3)*CpH2O;
46 |
47 | Cp_V1(x1, T1) = y1(x1, T1)*CpCH3OH + (1-y1(x1, T1))*CpH2O; % molar heat
    | capacity of the vapour at each tray
48 | Cp_V2(x2, T2) = y2(x2, T2)*CpCH3OH + (1-y2(x2, T2))*CpH2O;
49 | Cp_V3(x3, T3) = y3(x3, T3)*CpCH3OH + (1-y3(x3, T3))*CpH2O;
50 |
51 | Cp_Lf = xf*CpCH3OH + (1-xf)*CpH2O; % molar heat capacity of the
    | liquid of the feed
52 | Cp_Vf = yf*CpCH3OH + (1-yf)*CpH2O; % molar heat capacity of the
    | vapour of the feed
53 |
54 |
55 | %% Equations
56 |
57 | syms R
58 | syms V(R) L(R)
59 |
60 | D = ((xb-zf)/(xb-xd))*F;
61 | B = ((zf-xd)/(xb-xd))*F;
62 | V(R) = ((xb-zf)/(xb-xd))*F*(1+R)-Vf;
63 | L(R) = ((xb-zf)/(xb-xd))*F*R;
64 |
65 |
66 | %%%%%%%%%%% Reboiler %%%%%%%%%%%
67 | syms dx_reboiler(x1, x2, T1, T2, R) % i=1; i+1=2
68 | syms dT_reboiler(x1, x2, T1, T2, R)
69 |
70 | dx_reboiler(x1, x2, T1, T2, R) = (1/Mb) * ((L(R)+Lf)*x2 - V(R)*y1(x1, T1) - B*
    | x1);
71 | dT_reboiler(x1, x2, T1, T2, R) = (1/(Mb*Cp_L1(x1))) * ((L(R)+Lf)*Cp_L2(x2)*
    | (T2-T1) - V(R)*Cp_V1(x1, T1)*(T1-T2) - B*Cp_L1(x1)*(T1-T2) + Q);
72 |
73 | dxdx1_reboiler = diff(dx_reboiler, x1);
74 | dxdx2_reboiler = diff(dx_reboiler, x2);
75 | dxdT1_reboiler = diff(dx_reboiler, T1);
76 | dxdT2_reboiler = diff(dx_reboiler, T2);
77 |
78 | dTdx1_reboiler = diff(dT_reboiler, x1);
79 | dTdx2_reboiler = diff(dT_reboiler, x2);
80 | dTdT1_reboiler = diff(dT_reboiler, T1);

```

```

81 dTdT2_reboiler = diff(dT_reboiler ,T2);
82
83 dxdR_reboiler = diff(dx_reboiler ,R);
84 dTdR_reboiler = diff(dT_reboiler ,R);
85
86
87 %%%%%%%%%%% Stripping section : Tray for i=2 to nf %%%%%%%%%%%
88 syms dx_stripping(x1,x2,x3,T1,T2,T3,R) % i-1=1; i=2; i+1=3
89 syms dT_stripping(x1,x2,x3,T1,T2,T3,R)
90
91 dx_stripping(x1,x2,x3,T1,T2,T3,R)=(1/Mt)*(V(R)*(y1(x1,T1)-y2(x2,T2))
+ (L(R)+Lf)*(x3-x2));
92 dT_stripping(x1,x2,x3,T1,T2,T3,R)=(1/(Mt*Cp_L2(x2)))*((L(R)+Lf)*Cp_L3
(x3)*(T3-T2) - (L(R)+Lf)*Cp_L2(x2)*(T2-T1) + V(R)*Cp_V1(x1,T1)*(T1
-T2) - V(R)*Cp_V2(x2,T2)*(T2-T3));
93
94 dxdx1_stripping = diff(dx_stripping ,x1);
95 dxdx2_stripping = diff(dx_stripping ,x2);
96 dxdx3_stripping = diff(dx_stripping ,x3);
97 dxdT1_stripping = diff(dx_stripping ,T1);
98 dxdT2_stripping = diff(dx_stripping ,T2);
99 dxdT3_stripping = diff(dx_stripping ,T3);
100
101 dTdx1_stripping = diff(dT_stripping ,x1);
102 dTdx2_stripping = diff(dT_stripping ,x2);
103 dTdx3_stripping = diff(dT_stripping ,x3);
104 dTdT1_stripping = diff(dT_stripping ,T1);
105 dTdT2_stripping = diff(dT_stripping ,T2);
106 dTdT3_stripping = diff(dT_stripping ,T3);
107
108 dxdR_stripping = diff(dx_stripping ,R);
109 dTdR_stripping = diff(dT_stripping ,R);
110
111
112 %%%%%%%%%%% Feeding tray (i=nf+1) %%%%%%%%%%%
113 syms dx_feed(x1,x2,x3,T1,T2,T3,R) % nf=1; nf+1=2; nf+2=3
114 syms dT_feed(x1,x2,x3,T1,T2,T3,R)
115
116 dx_feed(x1,x2,x3,T1,T2,T3,R)=(1/Mt)*(V(R)*(y1(x1,T1)-y2(x2,T2)) + Vf
*(yf-y2(x2,T2)) + L(R)*x3 - (L(R)+Lf)*x2 + Lf*xf);
117 dT_feed(x1,x2,x3,T1,T2,T3,R)=(1/(Mt*Cp_L2(x2)))*((L(R)+Lf)*Cp_L3(x3)*(T3-
T2) - (L(R)+Lf)*Cp_L2(x2)*(T2-T1) + V(R)*Cp_V1(x1,T1)*(T1-T2) - (V
(R)+Vf)*Cp_V2(x2,T2)*(T2-T3) + Lf*Cp_Lf*(Tf-T2) + Vf*Cp_Vf*(Tf-T2)
);
118
119 dxdx1_feed = diff(dx_feed ,x1);
120 dxdx2_feed = diff(dx_feed ,x2);
121 dxdx3_feed = diff(dx_feed ,x3);
122 dxdT1_feed = diff(dx_feed ,T1);

```

```

123 dxdT2_feed = diff(dx_feed ,T2);
124 dxdT3_feed = diff(dx_feed ,T3);
125
126 dTdx1_feed = diff(dT_feed ,x1);
127 dTdx2_feed = diff(dT_feed ,x2);
128 dTdx3_feed = diff(dT_feed ,x3);
129 dTdT1_feed = diff(dT_feed ,T1);
130 dTdT2_feed = diff(dT_feed ,T2);
131 dTdT3_feed = diff(dT_feed ,T3);
132
133 dxdR_feed = diff(dx_feed ,R);
134 dTdR_feed = diff(dT_feed ,R);
135
136
137 %%%%%%%%%% Rectifying section : Tray for i=nf+2 to N+1 %%%%%%%%%%
138 syms dx_rectifying(x1 ,x2 ,x3 ,T1 ,T2 ,T3 ,R) % i-1=1; i=2; i+1=3
139 syms dT_rectifying(x1 ,x2 ,x3 ,T1 ,T2 ,T3 ,R)
140
141 dx_rectifying(x1 ,x2 ,x3 ,T1 ,T2 ,T3 ,R)=(1/Mt)*((V(R)+Vf)*(y1(x1 ,T1)-y2(x2
    ,T2)) + L(R)*(x3-x2));
142 dT_rectifying(x1 ,x2 ,x3 ,T1 ,T2 ,T3 ,R)=(1/(Mt*Cp_L2(x2)))*(L(R)*Cp_L3(x3)
    *(T3-T2) - L(R)*Cp_L2(x2)*(T2-T1) + (V(R)+Vf)*Cp_V1(x1 ,T1)*(T1-T2)
    - (V(R)+Vf)*Cp_V2(x2 ,T2)*(T2-T3));
143
144 dxdx1_rectifying = diff(dx_rectifying ,x1);
145 dxdx2_rectifying = diff(dx_rectifying ,x2);
146 dxdx3_rectifying = diff(dx_rectifying ,x3);
147 dxdT1_rectifying = diff(dx_rectifying ,T1);
148 dxdT2_rectifying = diff(dx_rectifying ,T2);
149 dxdT3_rectifying = diff(dx_rectifying ,T3);
150
151 dTdx1_rectifying = diff(dT_rectifying ,x1);
152 dTdx2_rectifying = diff(dT_rectifying ,x2);
153 dTdx3_rectifying = diff(dT_rectifying ,x3);
154 dTdT1_rectifying = diff(dT_rectifying ,T1);
155 dTdT2_rectifying = diff(dT_rectifying ,T2);
156 dTdT3_rectifying = diff(dT_rectifying ,T3);
157
158 dxdR_rectifying = diff(dx_rectifying ,R);
159 dTdR_rectifying = diff(dT_rectifying ,R);
160
161
162 %%%%%%%%%% Condenser %%%%%%%%%%
163 syms dx_condenser(x1 ,x2 ,T1 ,T2 ,R) % N+1=1; N+2=2
164 syms dT_condenser(x1 ,x2 ,T1 ,T2 ,R)
165
166 dx_condenser(x1 ,x2 ,T1 ,T2 ,R)=(1/Md)*((V(R)+Vf)*y1(x1 ,T1) - L(R)*x2 - D
    *x2);
167 dT_condenser(x1 ,x2 ,T1 ,T2 ,R)=(1/Md*Cp_L2(x2))*((V(R)+Vf)*Cp_V1(x1 ,T1)

```

```

    *(T1-T2) - (L(R)+D)*Cp_L2(x2)*(T2-Td));
168
169 dxdx1_condenser = diff(dx_condenser,x1);
170 dxdx2_condenser = diff(dx_condenser,x2);
171 dxdT1_condenser = diff(dx_condenser,T1);
172 dxdT2_condenser = diff(dx_condenser,T2);
173
174 dTdx1_condenser = diff(dT_condenser,x1);
175 dTdx2_condenser = diff(dT_condenser,x2);
176 dTdT1_condenser = diff(dT_condenser,T1);
177 dTdT2_condenser = diff(dT_condenser,T2);
178
179 dxdR_condenser = diff(dx_condenser,R);
180 dTdR_condenser = diff(dT_condenser,R);
181
182
183 len_x = length(x);
184 A = zeros(2*len_x,2*len_x);
185 B_mat = zeros(2*len_x,1);
186 C_mat = zeros(1,2*len_x);
187
188 C_mat(len_x) = 1;
189
190 %%%%%%%%%%% reboiler %%%%%%%%%%%
191 A(1,1) = dxdx1_reboiler(x(1),x(2),T(1),T(2),R_eq);
192 A(1,2) = dxdx2_reboiler(x(1),x(2),T(1),T(2),R_eq);
193 A(1,len_x+1) = dxdT1_reboiler(x(1),x(2),T(1),T(2),R_eq);
194 A(1,len_x+2) = dxdT2_reboiler(x(1),x(2),T(1),T(2),R_eq);
195
196 A(len_x+1,1) = dTdx1_reboiler(x(1),x(2),T(1),T(2),R_eq);
197 A(len_x+1,2) = dTdx2_reboiler(x(1),x(2),T(1),T(2),R_eq);
198 A(len_x+1,len_x+1) = dTdT1_reboiler(x(1),x(2),T(1),T(2),R_eq);
199 A(len_x+1,len_x+2) = dTdT2_reboiler(x(1),x(2),T(1),T(2),R_eq);
200
201 B_mat(1) = dxdR_reboiler(x(1),x(2),T(1),T(2),R_eq);
202 B_mat(len_x+1) = dTdR_reboiler(x(1),x(2),T(1),T(2),R_eq);
203
204
205 %%%%%%%%%%% Stripping section : Tray for i=2 to nf %%%%%%%%%%%
206 for i=2:nf
207     A(i,i-1) = dxdx1_stripping(x(i-1),x(i),x(i+1),T(i-1),T(i),T(i+1),
208         R_eq);
209     A(i,i) = dxdx2_stripping(x(i-1),x(i),x(i+1),T(i-1),T(i),T(i+1),
210         R_eq);
211     A(i,i+1) = dxdx3_stripping(x(i-1),x(i),x(i+1),T(i-1),T(i),T(i+1),
212         R_eq);
213     A(i,len_x+i-1) = dxdT1_stripping(x(i-1),x(i),x(i+1),T(i-1),T(i),T
214         (i+1),R_eq);
215     A(i,len_x+i) = dxdT2_stripping(x(i-1),x(i),x(i+1),T(i-1),T(i),T(i

```

```

    +1),R_eq);
212 A(i,len_x+i+1) = dxdT3_stripping(x(i-1),x(i),x(i+1),T(i-1),T(i),T
    (i+1),R_eq);
213
214 A(len_x+i,i-1) = dTdx1_stripping(x(i-1),x(i),x(i+1),T(i-1),T(i),T
    (i+1),R_eq);
215 A(len_x+i,i) = dTdx2_stripping(x(i-1),x(i),x(i+1),T(i-1),T(i),T(i
    +1),R_eq);
216 A(len_x+i,i+1) = dTdx3_stripping(x(i-1),x(i),x(i+1),T(i-1),T(i),T
    (i+1),R_eq);
217 A(len_x+i,len_x+i-1) = dTdT1_stripping(x(i-1),x(i),x(i+1),T(i-1),
    T(i),T(i+1),R_eq);
218 A(len_x+i,len_x+i) = dTdT2_stripping(x(i-1),x(i),x(i+1),T(i-1),T(
    i),T(i+1),R_eq);
219 A(len_x+i,len_x+i+1) = dTdT3_stripping(x(i-1),x(i),x(i+1),T(i-1),
    T(i),T(i+1),R_eq);
220
221 B_mat(i) = dx dR_stripping(x(i-1),x(i),x(i+1),T(i-1),T(i),T(i+1),
    R_eq);
222 B_mat(len_x+i) = dTdR_stripping(x(i-1),x(i),x(i+1),T(i-1),T(i),T(
    i+1),R_eq);
223 end
224
225
226 %%%%%%%%%%% Feeding tray (i=nf+1) %%%%%%%%%%%
227 A(nf+1,nf) = dx dx1_feed(x(nf),x(nf+1),x(nf+2),T(nf),T(nf+1),T(nf+2),
    R_eq);
228 A(nf+1,nf+1) = dx dx2_feed(x(nf),x(nf+1),x(nf+2),T(nf),T(nf+1),T(nf+2)
    ,R_eq);
229 A(nf+1,nf+2) = dx dx3_feed(x(nf),x(nf+1),x(nf+2),T(nf),T(nf+1),T(nf+2)
    ,R_eq);
230 A(nf+1,len_x+nf) = dx dT1_feed(x(nf),x(nf+1),x(nf+2),T(nf),T(nf+1),T(
    nf+2),R_eq);
231 A(nf+1,len_x+nf+1) = dx dT2_feed(x(nf),x(nf+1),x(nf+2),T(nf),T(nf+1),T
    (nf+2),R_eq);
232 A(nf+1,len_x+nf+2) = dx dT3_feed(x(nf),x(nf+1),x(nf+2),T(nf),T(nf+1),T
    (nf+2),R_eq);
233
234 A(len_x+nf+1,nf) = dTdx1_feed(x(nf),x(nf+1),x(nf+2),T(nf),T(nf+1),T(
    nf+2),R_eq);
235 A(len_x+nf+1,nf+1) = dTdx2_feed(x(nf),x(nf+1),x(nf+2),T(nf),T(nf+1),T
    (nf+2),R_eq);
236 A(len_x+nf+1,nf+2) = dTdx3_feed(x(nf),x(nf+1),x(nf+2),T(nf),T(nf+1),T
    (nf+2),R_eq);
237 A(len_x+nf+1,len_x+nf) = dTdT1_feed(x(nf),x(nf+1),x(nf+2),T(nf),T(nf
    +1),T(nf+2),R_eq);
238 A(len_x+nf+1,len_x+nf+1) = dTdT2_feed(x(nf),x(nf+1),x(nf+2),T(nf),T(
    nf+1),T(nf+2),R_eq);
239 A(len_x+nf+1,len_x+nf+2) = dTdT3_feed(x(nf),x(nf+1),x(nf+2),T(nf),T(

```

```

    nf+1),T(nf+2),R_eq);
240
241 B_mat(nf+1) = dxR_feed(x(nf),x(nf+1),x(nf+2),T(nf),T(nf+1),T(nf+2),
    R_eq);
242 B_mat(len_x+nf+1) = dTdR_feed(x(nf),x(nf+1),x(nf+2),T(nf),T(nf+1),T(
    nf+2),R_eq);
243
244
245 %%%%%%%%%% Rectifying section : Tray for i=nf+2 to N+1 %%%%%%%%%%
246 for i=nf+2:N+1
247     A(i,i-1) = dx1_rectifying(x(i-1),x(i),x(i+1),T(i-1),T(i),T(i+1)
        ,R_eq);
248     A(i,i) = dx2_rectifying(x(i-1),x(i),x(i+1),T(i-1),T(i),T(i+1),
        R_eq);
249     A(i,i+1) = dx3_rectifying(x(i-1),x(i),x(i+1),T(i-1),T(i),T(i+1)
        ,R_eq);
250     A(i,len_x+i-1) = dxT1_rectifying(x(i-1),x(i),x(i+1),T(i-1),T(i),
        T(i+1),R_eq);
251     A(i,len_x+i) = dxT2_rectifying(x(i-1),x(i),x(i+1),T(i-1),T(i),T(
        i+1),R_eq);
252     A(i,len_x+i+1) = dxT3_rectifying(x(i-1),x(i),x(i+1),T(i-1),T(i),
        T(i+1),R_eq);
253
254     A(len_x+i,i-1) = dTdx1_rectifying(x(i-1),x(i),x(i+1),T(i-1),T(i),
        T(i+1),R_eq);
255     A(len_x+i,i) = dTdx2_rectifying(x(i-1),x(i),x(i+1),T(i-1),T(i),T(
        i+1),R_eq);
256     A(len_x+i,i+1) = dTdx3_rectifying(x(i-1),x(i),x(i+1),T(i-1),T(i),
        T(i+1),R_eq);
257     A(len_x+i,len_x+i-1) = dTdT1_rectifying(x(i-1),x(i),x(i+1),T(i-1)
        ,T(i),T(i+1),R_eq);
258     A(len_x+i,len_x+i) = dTdT2_rectifying(x(i-1),x(i),x(i+1),T(i-1),T(
        i),T(i+1),R_eq);
259     A(len_x+i,len_x+i+1) = dTdT3_rectifying(x(i-1),x(i),x(i+1),T(i-1)
        ,T(i),T(i+1),R_eq);
260
261     B_mat(i) = dxR_rectifying(x(i-1),x(i),x(i+1),T(i-1),T(i),T(i+1),
        R_eq);
262     B_mat(len_x+i) = dTdR_rectifying(x(i-1),x(i),x(i+1),T(i-1),T(i),T(
        i+1),R_eq);
263 end
264
265
266 %%%%%%%%%% Condenser %%%%%%%%%%
267 A(len_x,len_x-1) = dx1_condenser(x(len_x-1),x(len_x),T(len_x-1),T(
        len_x),R_eq);
268 A(len_x,len_x) = dx2_condenser(x(len_x-1),x(len_x),T(len_x-1),T(
        len_x),R_eq);
269 A(len_x,2*len_x-1) = dxT1_condenser(x(len_x-1),x(len_x),T(len_x-1),T(

```

```

    (len_x),R_eq);
270 A(len_x,2*len_x) = dxdT2_condenser(x(len_x-1),x(len_x),T(len_x-1),T(
    len_x),R_eq);
271
272 A(2*len_x,len_x-1) = dTdx1_condenser(x(len_x-1),x(len_x),T(len_x-1),T(
    len_x),R_eq);
273 A(2*len_x,len_x) = dTdx2_condenser(x(len_x-1),x(len_x),T(len_x-1),T(
    len_x),R_eq);
274 A(2*len_x,2*len_x-1) = dTdT1_condenser(x(len_x-1),x(len_x),T(len_x-1)
    ,T(len_x),R_eq);
275 A(2*len_x,2*len_x) = dTdT2_condenser(x(len_x-1),x(len_x),T(len_x-1),T(
    len_x),R_eq);
276
277 B_mat(len_x) = dxdR_condenser(x(len_x-1),x(len_x),T(len_x-1),T(len_x)
    ,R_eq);
278 B_mat(2*len_x) = dTdR_condenser(x(len_x-1),x(len_x),T(len_x-1),T(
    len_x),R_eq);
279
280
281 end

```

UNIVERSITÉ CATHOLIQUE DE LOUVAIN
École polytechnique de Louvain

Rue Archimède, 1 bte L6.11.01, 1348 Louvain-la-Neuve, Belgique | www.uclouvain.be/epl