



HAL
open science

Contribution à l'étude des modèles de colonne à distiller

Guy Bornard

► **To cite this version:**

| Guy Bornard. Contribution à l'étude des modèles de colonne à distiller. Modélisation et simulation.
| Université Joseph-Fourier - Grenoble I, 1971. tel-00282845

HAL Id: tel-00282845

<https://theses.hal.science/tel-00282845>

Submitted on 28 May 2008

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

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

THÈSE

présentée

A L'UNIVERSITÉ SCIENTIFIQUE ET MÉDICALE DE GRENOBLE

pour obtenir

LE TITRE DE DOCTEUR ÈS-SCIENCES PHYSIQUES

PAR

Guy BORNARD

Ingénieur A. M. - Ingénieur I. A. G.

Contribution à l'étude des modèles
de colonne à distiller

Soutenu le 8 Novembre 1971 devant la Commission d'Examen

JURY

MM. L. NÉEL

Président

P. TRAYNARD

R. PERRET

P. LAURENT

} *Examineurs*

L. BADGUÉRAHANIAN

Invité

Président : Monsieur Michel SOUTIF
Vice-Président : Monsieur Gabriel CAU

PROFESSEURS TITULAIRES

MM.	ANGLES D'AURIAC Paul	Mécanique des fluides
	ARNAUD Georges	Clinique des maladies infectieuses
	ARNAUD Paul	Chimie
	AYANT Yves	Physique approfondie
Mme	BARBIER Marie-Jeanne	Electrochimie
MM.	BARBIER Jean-Claude	Physique expérimentale
	BARBIER Reynold	Géologie appliquée
	BARJON Robert	Physique nucléaire
	BARNOUD Fernand	Biosynthèse de la cellulose
	BARRA Jean-René	Statistiques
	BARRIE Joseph	Clinique chirurgicale
	BENOIT Jean	Radioélectricité
	BESSON Jean	Electrochimie
	BEZES Henri	Chirurgie générale
	BLAMBERT Maurice	Mathématiques Pures
	BOLLIET Louis	Informatique (IUT B)
	BONNET Georges	Electrotechnique
	BONNET Jean-Louis	Clinique ophtalmologique
	BONNET-EYMARD Joseph	Pathologie médicale
	BONNIER Etienne	Electrochimie Electrometallurgie
	BOUCHERLE André	Chimie et Toxicologie
	BOUCHEZ Robert	Physique nucléaire
	BRAVARD Yves	Géographie
	BRISSONNEAU Pierre	Physique du Solide
	BUYLE-BODIN Maurice	Electronique
	CABANAC Jean	Pathologie chirurgicale
	CABANEL Guy	Clinique rhumatologique et hydrologie
	CALAS François	Anatomie
	CARRAZ Gilbert	Biologie animale et pharmacodynamie
	CAU Gabriel	Médecine légale et Toxicologie
	CAUQUIS Georges	Chimie organique
	CHABAUTY Claude	Mathématiques Pures
	CHARACHON Robert	Oto-Rhino-Laryngologie
	CHATEAU Robert	Thérapeutique
	CHENE Marcel	Chimie papetière
	COEUR André	Pharmacie chimique
	CONTAMIN Robert	Clinique gynécologique
	COUDERC Pierre	Anatomie Pathologique
	CRAYA Antoine	Mécanique
Mme	DEBELMAS Anne-Marie	Matière médicale
MM.	DEBELMAS Jacques	Géologie générale
	DEGRANGE Charles	Zoologie
	DESSAUX Georges	Physiologie animale
	DODU Jacques	Mécanique appliquée
	DREYFUS Bernard	Thermodynamique
	DUCROS Pierre	Cristallographie

MM.	DUGOIS Pierre	Clinique de Dermatologie et Syphiligraphie
	FAU René	Clinique neuro-psychiatrique
	FELICI Noël	Electrostatique
	GAGNAIRE Didier	Chimie physique
	GALLISSOT François	Mathématiques pures
	GALVANI Octave	Mathématiques pures
	GASTINEL Noël	Analyse numérique
	GERBER Robert	Mathématiques pures
	GIRAUD Pierre	Géologie
	KLEIN Joseph	Mathématiques pures
Mme	KOFLER Lucie	Botanique et Physiologie végétale
MM.	KOSZUL Jean-Louis	Mathématiques pures
	KRAVTCHENKO Julien	Mécanique
	KUNTZMANN Jean	Mathématiques appliquées
	LACAZE Albert	Thermodynamique
	LACHARME Jean	Biologie végétale
	LATREILLE René	Chirurgie générale
	LATURAZE Jean	Biochimie pharmaceutique
	LAURENT Pierre	Mathématiques appliquées
	LEDRU Jean	Clinique médicale B
	LLIBOUTRY Louis	Géophysique
	LOUP Jean	Géographie
Mlle	LUTZ Elisabeth	Mathématiques pures
MM.	MALGRANGE Bernard	Mathématiques pures
	MALINAS Yves	Clinique obstétricale
	MARTIN-NOEL Pierre	Seméiologie médicale
	MASSEPORT Jean	Géographie
	MAZARE Yves	Clinique médicale A
	MICHEL Robert	Minéralogie et Pétrographie
	MOURIQUAND Claude	Histologie
	MOUSSA André	Chimie nucléaire
	NEEL Louis	Physique du solide
	OZENDA Paul	Botanique
	PAUTHENET René	Electrotechnique
	PAYAN Jean-Jacques	Mathématiques pures
	PEBAY-PEYROULA Jean-Claude	Physique
	PERRET René	Servomécanismes
	PILLET Emile	Physique industrielle
	RASSAT André	Chimie systématique
	RENARD Michel	Thermodynamique
	REULOS René	Physique industrielle
	RINALDI Renaud	Physique
	ROGET Jean	Clinique de pédiatrie et de puériculture
	SANTON Lucien	Mécanique
	SEIGNEURIN Raymond	Microbiologie et Hygiène
	SENGEL Philippe	Zoologie
	SILBERT Robert	Mécanique des fluides
	SOUTIF Michel	Physique générale
	TANCHE Maurice	Physiologie
	TRAYNARD Philippe	Chimie générale
	VAILLAND François	Zoologie
	VAUQUOIS Bernard	Calcul électronique
Mme	VERAIN Alice	Pharmacie galénique
M.	VERAIN André	Physique
Mme	VEYPRET Germaine	Géographie
MM.	VEYPRET Paul	Géographie
	VIGNAIS Pierre	Biochimie médicale
	YOCOZ Jean	Physique nucléaire théorique

PROFESSEURS ASSOCIES

MM.	BULLEMER Bernhard	Physique
	RADHAKRISHNA Pidatala	Thermodynamique

PROFESSEURS SANS CHAIRE

MM.	AUBERT Guy	Physique
	BEAUDOING André	Pédiatrie
	BERTRANDIAS Jean-Paul	Mathématiques appliquées
	BIAREZ Jean-Pierre	Mécanique
	BONNETAIN Lucien	Chimie minérale
Mme	BONNIER Jane	Chimie générale
MM.	CARLIER Georges	Biologie végétale
	COHEN Joseph	Electrotechnique
	COUMES André	Radioélectricité
	DEPASSEL Roger	Mécanique des fluides
	DEPORTES Charles	Chimie minérale
	DESRE Pierre	Métallurgie
	DOLIQUE Jean-Michel	Physique des plasmas
	GAUTHIER Yves	Sciences biologiques
	GEINDRE Michel	Electroradiologie
	GIDON Paul	Géologie et Minéralogie
	GLENAT René	Chimie organique
	HACQUES Gérard	Calcul numérique
	JANIN Bernard	Géographie
Mme	KANANE Josette	Physique
MM.	MULLER Jean-Michel	Thérapeutique
	PERRIAUX Jean-Jacques	Géologie et minéralogie
	POULOUJADOFF Michel	Electrotechnique
	REBECQ Jacques	Biologie (CUS)
	REVOL Michel	Urologie
	REYMOND Jean-Charles	Chirurgie générale
	ROBERT André	Chimie papetière
	SARRAZIN Roger	Anatomie et chirurgie
	SARROT-REYNAULD Jean	Géologie
	SIBILLE Robert	Construction Mécanique
	SIROT Louis	Chirurgie générale
Mme	SOUTIF Jeanne	Physique générale
M.	VALENTIN Jacques	Physique nucléaire

MAITRES DE CONFERENCES ET MAITRES DE CONFERENCES AGREGES

Mlle	AGNIUS-DELORD Claudine	Physique pharmaceutique
	ALARY Josette	Chimie analytique
MM.	AMBLARD Pierre	Dermatologie
	AMBROISE-THOMAS Pierre	Parasitologie
	ARMAND Yves	Chimie
	BEGUIN Claude	Chimie organique
	BELORIZKY Elie	Physique
	BENZAKEN Claude	Mathématiques appliquées
Mme	BERTRANDIAS Françoise	Mathématiques pures
MM.	BLIMAN Samuel	Electronique (EIE)
	BLOCH Daniel	Electrotechnique
Mme	BOUCHE Liane	Mathématiques (CUS)
MM.	BOUCHET Yves	Anatomie
	BOUSSARD Jean-Claude	Mathématiques appliquées
	BOUVARD Maurice	Mécanique des fluides
	BRIERE Georges	Physique expérimentale

MM.	BRODEAU François	Mathématiques (IUT B)
	BRUGEL Lucien	Energétique
	BUISSON Roger	Physique
	BUTEL Jean	Orthopédie
	CHAMBAZ Edmond	Biochimie médicale
	CHAMPETIER Jean	Anatomie et organogénèse
	CHIAVERINA Jean	Biologie appliquée (EFP)
	CHIBON Pierre	Biologie animale
	COHEN-ADDAD Jean-Pierre	Spectrométrie physique
	COLOMB Maurice	Biochimie médicale
	CONTE René	Physique
	CROUZET Guy	Radiologie
	DURAND Francis	Métallurgie
	DUSSAUD René	Mathématiques (CUS)
Mme	ETERRADOSSI Jacqueline	Physiologie
MM.	FAURE Jacques	Médecine légale
	GAVEND Michel	Pharmacologie
	GENSAC Pierre	Botanique
	GERMAIN Jean-Pierre	Mécanique
	GIDON Maurice	Géologie
	GRIFFITHS Michaël	Mathématiques appliquées
	GROULADE Joseph	Biochimie médicale
	HOLLARD Daniel	Hématologie
	HUGONOT Robert	Hygiène et médecine préventive
	IDELMAN Simon	Physiologie animale
	IVANES Marcel	Electricité
	JALBERT Pierre	Histologie
	JOLY Jean-René	Mathématiques pures
	JOUBERT Jean-Claude	Physique du solide
	JULLIEN Pierre	Mathématiques pures
	KAHANE André	Physique générale
	KUHN Gérard	Physique
Mme	LAJZEROWICZ Jeannine	Physique
MM.	LAJZEROWICZ Joseph	Physique
	LANCIA Roland	Physique atomique
	LE JUNTER Noël	Electronique
	LEROY Philippe	Mathématiques
	LOISEAUX Jean-Marie	Physique nucléaire
	LONGUEUE Jean-Pierre	Physique nucléaire
	LUU DUC Cuong	Chimie organique
	MACHE Régis	Physiologie végétale
	MAGNIN Robert	Hygiène et médecine préventive
	MARECHAL Jean	Mécanique
	MARTIN-BOUYER Michel	Chimie (CUS)
	MAYNARD Roger	Physique du solide
	MICOUD Max	Maladies infectieuses
	MOREAU René	Hydraulique (INP)
	NEGRE Robert	Mécanique
	PARABELLE Bernard	Pneumologie
	PECCOUD François	Analyse (IUT B)
	PEFFEN René	Métallurgie
	PELMONT Jean	Physiologie animale
	PERRET Jean	Neurologie
	PERRIN Louis	Pathologie expérimentale
	PFISTER Jean-Claude	Physique du solide
	PHELIP Xavier	Rhumatologie
Mlle	PIERY Yvette	Biologie animale

MM.	RACHAIL Michel	Médecine interne
	RACINET Claude	Gynécologie et obstétrique
	RICHARD Lucien	Botanique
Mme	RINAUDO Marguerite	Chimie macromoléculaire
MM.	ROMIER Guy	Mathématiques (IUT B)
	ROUGEMONT (DE) Jacques	Neuro-Chirurgie
	STIEGLITZ Paul	Anesthésiologie
	STOEBNER Pierre	Anatomie pathologique
	VAN CUTSEM Bernard	Mathématiques appliquées
	VEILLON Gérard	Mathématiques appliquées (INP)
	VIALON Pierre	Géologie
	VOOG Robert	Médecine interne
	VROUSSOS Constantin	Radiologie
	ZADWORNY François	Electronique

MAITRES DE CONFERENCES ASSOCIES

MM.	BOUDOURIS Georges	Radioélectricité
	CHEEKE John	Thermodynamique
	GOLDSCHMIDT Hubert	Mathématiques
	YACOUD Mahmoud	Médecine légale

CHARGES DE FONCTIONS DE MAITRES DE CONFERENCES

Mme	BERIEL Hélène	Physiologie
Mme	RENAUDET Jacqueline	Microbiologie

AVANT-PROPOS

Dans le cadre de la Délégation à la Recherche Scientifique et Technique, ce travail a été effectué grâce à la collaboration des Sociétés Naphtachimie et Télémechanique Electrique et du Laboratoire d'Automatique de l'Institut National Polytechnique de Grenoble.

Je tiens à exprimer toute ma gratitude à Monsieur le Professeur NEEL, Prix Nobel de Physique, Membre de l'Institut, qui a bien voulu me faire l'honneur de présider le jury de cette thèse.

Je remercie vivement Monsieur le Professeur TRAYNARD d'avoir accepté de prendre mon travail en considération et de participer au jury.

Que Monsieur le Professeur PERRET, qui m'a accueilli au Laboratoire d'Automatique, et dont l'enseignement, les conseils et les encouragements m'ont été d'un constant secours, sache combien je lui suis reconnaissant.

Je remercie Monsieur le Professeur LAURENT d'avoir examiné avec bienveillance cette thèse et accepté de participer au jury.

Que Monsieur BADGUERAHANIAN, qui a suivi mes travaux avec intérêt et sympathie et m'a accordé des entretiens très enrichissants, soit assuré de ma profonde reconnaissance.

Je sais gré à Monsieur le Docteur MASSIEU de m'avoir permis de continuer ce travail lors de mon séjour au Centre de Recherches et d'Etudes Avancées de Mexico, ainsi qu'aux personnes du Département de Génie Electrique de cette Institution pour l'accueil qu'elles m'y ont réservé.

Je tiens aussi à dire ma gratitude aux personnes que j'ai rencontrées dans les Sociétés Télémechanique Electrique et Naphtachimie pour l'aide efficace qu'elles m'ont apportée, à travers les discussions et les nombreux échanges auxquels nous nous sommes livrés.

Quant à Monsieur COCHET et à tous mes camarades du Laboratoire d'Automatique, qu'ils reçoivent mes plus vifs remerciements pour la participation amicale qu'ils ont souvent apportée à ce travail.

S O M M A I R E

	Pages
NOTATIONS -----	N-1
INTRODUCTION -----	0-1
CHAPITRE I : SYSTEME D'EQUATIONS FORMANT LE MODELE D'UNE COLONNE CONVENTIONNELLE -----	I-1
I-1 : Hypothèses de travail -----	I-2
I-2 : Modèle thermodynamique du mélange distillé	I-3
I-2.1. Equilibres liquide-vapeur -----	I-3
I-2.1.a. Utilisation de la pression de convergence -----	I-4
I-2.1.b. Utilisation des fugacités et des coefficients d'acti- vité -----	I-4
I-2.2. Enthalpies des phases liquide et va- peur du mélange distillé -----	I-9
I-3 : Mise en équations du modèle de la colonne	I-11
I-3.1. Bilans matériels -----	I-11
I-3.2. Bilans enthalpiques -----	I-12
I-3.3. Equilibres liquide-vapeur -----	I-12
I-3.4. Enthalpies -----	I-13
I-3.5. Efficacités des plateaux -----	I-13
I-3.6. Etat du flux d'alimentation -----	I-16
I-3.7. Plateau d'alimentation -----	I-17
I-4 : Variables indépendantes, variables dépen- dantes -----	I-18
TABLEAU I.1	I-19
FIGURE I.1	I-20
I.2.a	I-21
I.2.b	I-21
I.3	I-22
CHAPITRE II : METHODES DE RESOLUTION EXISTANTES -----	II-1
II.1 : Méthodes de THIELE-GEEDES -----	II-2
II.1.1. Algorithme de base -----	II-2
II.1.2. Convergence -----	II-3
II.1.3. Caractéristiques de ces méthodes	II-4
II.2 : Méthode de LEWIS-MATHESON -----	II-5
II.2.1. Algorithme de base -----	II-5
II.2.2. Convergence -----	II-6
II.2.3. Caractéristiques de ces méthodes	II-6

	Pages
11-3 : Méthodes de relaxation -----	11-7
11.3.1. Méthode des flash successifs	11-7
11.3.2. Caractéristiques des méthodes de relaxation -----	11-7
11-4 : Méthodes de "résolution simultanée"	11-8
11.4.1. Méthode de GOLSTEIN et STANFIELD	11-8
11.4.2. Caractéristiques des méthodes de résolution simultanée -----	11-9
11-5 : Conclusions sur les méthodes existantes	11-9
 FIGURE 11.1	 11-10
11.2	11-11
11.3	11-12
11.4	11-13
 CHAPITRE III : METHODE PROPOSEE. PHASE DE REDUCTION	 III-1
III-1 : Détermination de la structure de l'al- gorithme de calcul -----	III-3
III.1.1. Remarques générales -----	III-3
III.1.2. Algorithme général employé -----	III-4
III.1.3. Etude de la structure de l'algo- rithme de réduction -----	III-5
III-1.3.a. Vecteur indépendant, vecteur d'itération, vecteur d'erreur ----	III-6
III-1.3.b. Cas d'un algorithme fixe de réduction ---	III-8
III-1.3.c. Cas d'un algorithme de réduction à chemins multiples -----	III-8
III-1.3.d. Structure, critères d'élaboration de l'al- gorithme de réduction	III-9
III-2 : Algorithme de réduction. Calcul des équilibres liquide-vapeur -----	III-10
III.2.1. Point d'ébullition et point de condensation d'un mélange -----	III-11
III-2.1.a. Calcul du point d'ébul- lition d'un mélange en phase liquide -----	III-11
III-2.1.b. Calcul du point de con- densation d'un mélange en phase liquide ----	III-12
III-2.1.c. Existence et unicité de la solution, sécurité de convergence -----	III-12

III.2.2. Etat d'un mélange comportant une phase liquide et une phase vapeur en équilibre -----	III-15
III-2.2.a. Calcul d'état à température connue ----	III-16
III-2.2.b. Calcul d'état à enthalpie connue ---	III-17
III-2.2.c. Existence et unicité de la solution, sécurité de la convergence	III-18
III.2.3. Calcul accéléré des équilibres liquide-vapeur -----	III-21
III-3 : Algorithme de réduction. Partie commune	III-25
III.3.1. Calcul d'un plateau j courant par la méthode de DAVIS et SOBEL	III-26
III-3.1.a. Plateau $j-1$ connu	III-26
III-3.1.b. Plateau $j+1$ connu	III-27
III-3.1.c. Existence et unicité de la solution, sécurité de la convergence	III-27
III.3.2. Calcul d'un plateau j courant par la méthode de GREENSTADT, BARD et MORSE -----	III-30
III.3.3. Calcul des sections de la colonne	III-31
III.3.4. Calcul de l'état de l'alimentation	III-32
III.3.5. Calcul du plateau d'alimentation	III-32
III-3.5.a. Calcul de $ysfd, l_{jf-1}$ $vsfd, vifd$ -----	III-33
III-3.5.b. Calcul de $ysfb, lsfb,$ $vsfb, v_{jf}$ -----	III-33
III-3.5.c. Existence et unicité de la solution, sécurité de la convergence	III-33
III.3.6. Vecteur d'erreur, partie fondamentale -----	III-35
III.3.7. Vecteur d'entrée de la partie commune -----	III-37
III-4 : Algorithme de réduction. Partie multiple	III-37
III.4.1. Position du problème -----	III-37
III-4.1.a. Equations, variables, dimension du vecteur d'entrée -----	III-37
III-4.1.b. Constitution du vecteur d'entrée -----	III-38
III.4.2. Combinaisons incompatibles (f, zf, hf connus) -----	III-39

III.4.3. f, zf, hf, m variables parmi (d, b, yd, xb) et une variable parmi (lr, qc, qb) sont connues	III-40
III.4.3.a. Calcul des éléments inconnus de (d, b, yd, xb)	III-40
III.4.3.b. Calcul des variables dépendantes restantes	III-41
III.4.4. $f, zf, hf, (m-1)$ variables parmi (d, b, yd, xb) et 2 variables parmi (lr, qc, qb) sont connues	III-42
III.4.5. f, zf, hf ($m-2$) variables parmi d, b, yd, xb) et lr, qc, qb sont connues	III-44
III.4.6. Une ou plusieurs variables parmi (f, zf, hf) ne sont pas connus	III-44
III-4.6.a. f n'est pas connu ----	III-44
III-4.6.b. Des éléments de zf ne sont pas connus -----	III-44
III-4.6.c. hf n'est pas connu ----	III-45
III.4.7. Existence et unicité des solu- tions, sécurité de convergence des boucles d'itération -----	III-45
III-4.7.a. Calcul de d dans le cas B -----	III-45
III-4.7.b. Calcul des éléments inconnus de (yd, xb) dans les cas A et B	III-46
III-4.7.c. Calcul des éléments inconnus de (yd, xb) dans le cas C. -----	III-47
III-4.7.d. Calcul de lr dans les cas β, γ, ω -----	III-49
III-4.7.e. Calcul de d dans le cas D -----	III-49
III.4.8. Transformation des variables yd, xb .-----	III-49
III.4.9. Vecteur d'itération -----	III-51
III-5 : Extension du cas des colonnes complexes	III-51
III.5.1. Structure envisagée -----	III-51
III.5.2. Calcul d'un plateau complexe ----	III-52
III.5.3. Vecteur Indépendant, vecteur d'ité- ration, vecteur d'erreur -----	III-52
III-6 : Conclusions sur l'algorithme de réduction	III-53
FIGURE : III.1	III-55
III.2	III-56
III.3	III-57
III.4	III-58
III.5.a.	III-59

	Pages
III.5.b	III-59
III.6.a	III-60
III.6.b	III-61
III.7.a	III-62
III.7.b	III-63
III.8.	III-64
III.9.a	III-65
III.9.b.	III-66
III.10.a.	III-67
III.10.b.	III-67
III.11.a.	III-68
III.11.b.	III-68
III.12	III-69
III.13	III-70
CHAPITRE IV : METHODE PROPOSEE. PHASE DE CONVERGENCE.	IV-1
IV.1 Généralités -----	IV-2
IV.1.1. Critère de choix de la méthode	IV-2
IV.1.2. Norme de f^* , transformation de f^* et de x^* -----	IV-3
IV.2. Classe de méthode employée -----	IV-5
IV.2.1. Méthodes possibles -----	IV-5
IV.2.2. Méthode de DAVIDENKO -----	IV-7
IV.2.3. Méthode de NEWTON -----	IV-8
IV.3. Détermination de la suite de valeurs du paramètre s -----	IV-9
IV.3.1. Valeurs de s prédéterminées ---	IV-9
IV.3.2. Valeurs de s calculées -----	IV-10
IV.4. Détermination de l'inverse H_k du Jacobien approché -----	IV-12
IV.4.1. Méthode de base -----	IV-12
IV.4.2. Méthodes ne nécessitant pas d'évaluations supplémentaires de ϕ -----	IV-14
IV.4.2.a. Méthode de la sécante généralisée -----	IV-15
IV.4.2.b. Méthode de BARNES	IV-16
IV.4.2.c. Méthode de BROYDEN généralisée -----	IV-18
IV.5. Détermination de l'amplitude du pas d'itération -----	IV-20
IV.5.1. t_{k+1} fixé a priori -----	IV-20
IV.5.2. t_{k+1} déterminé par minimisation de v -----	IV-21
IV.6. Mise en oeuvre pratique du calcul-----	IV-21
IV.6.1. Choix de la matrice RF de normalisation de f -----	IV-22

IV.6.2. Choix de la matrice RX de normalisation de x -----	IV-22
IV.6.3. Première estimation de l'Inverse H du Jacobien -----	IV-25
IV.6.4. Algorithme simplifié de réduction	IV-26
IV.7. Etude expérimentale des différentes réalisations de la méthode de DAVIDENKO	IV-28
IV.7.1. Système sur lequel l'étude est réalisée -----	IV-28
IV.7.1.a. Colonne étudiée -----	IV-28
IV.7.1.b. Mélange distillé -----	IV-29
IV.7.1.c. Variables indépendantes	IV-29
IV.7.2. Etude des configurations de la méthode de NEWTON -----	IV-30
IV.7.3. Etude des configurations de la méthode de DAVIDENKO -----	IV-32
IV.7.4. Conclusions sur la méthode de convergence -----	IV-34
IV.8. Comparaison de la méthode de résolution proposée aux méthodes existantes -----	IV-35
TABLEAU IV.1	IV-37
IV.2	IV-37
IV.3	IV-38
IV.4	IV-39
IV.5	IV-40
IV.6	IV-41
IV.7	IV-42
FIGURE IV.1	IV-43
IV.2	IV-44
CHAPITRE V : APPLICATION DE LA METHODE PROPOSEE DANS LE CADRE D'UN PROBLEME INDUSTRIEL -----	V-1
V.1. Description des installations -----	V-2
V.1.1. Procédé étudié -----	V-2
V.1.2. Système numérique d'acquisition de données et de commande -----	V-2
V.2. Etude effectuée -----	V-3
V.2.1. Objectifs poursuivis -----	V-3
V.2.2. Structure de la commande -----	V-4
V.2.2.a. Régulation-----	V-4
V.2.2.b. Optimisation -----	V-4
V.2.3. Mise en oeuvre, rôle des modèles statiques -----	V-5

V.3. Identification des colonnes A et B.	V-8
V.3.1. Conditions expérimentales de l'identification -----	V-8
V.3.1.a. Obtention des régimes stables -----	V-8
V.3.1.b. Prélèvement et traitement des données ----	V-9
V.3.2. Identification de la colonne A	V-10
V.3.2.a. Mesures disponibles, caractérisation ----	V-10
V.3.2.b. Calculs d'adaptation, résultats obtenus ---	V-11
V.3.3. Identification de la colonne B	V-13
V.3.3.a. Mesures disponibles, caractérisation ----	V-13
V.3.3.b. Calculs d'adaptation, résultats obtenus ---	V-13
V.4. Utilisation des modèles des colonnes A et B -----	V-15
V.4.1. Etude de sensibilité de la colonne A. -----	V-15
V.4.2. Détermination des compensations prédictives de la colonne A	V-16
V.4.3. Optimisation de la colonne A	V-18
V.4.4. Etude de sensibilité de la colonne B -----	V-19
V.4.5. Optimisation de la colonne B	V-19
V.5. Conclusions sur les applications ----	V-20

TABLEAU V.1	V-21
V.2	V-21
V.3	V-21
V.4	V-22
V.5	V-22
V.6	V-23
V.7	V-24
V.8	V-25

FIGURE V.1	V-26
V.2	V-27
V.3	V-28
V.4	V-29
V.5	V-30
V.6	V-31
V.7	V-32
V.8	V-32
V.9	V-33
V.10	V-34
V.11	V-34

VI. CONCLUSION -----	VI-1
ANNEXE Méthode de MULLER pour la résolution d'une équation non-linéaire -----	A-1
BIBLIOGRAPHIE -----	B-1
1. Modèle mathématiques statiques des colonnes de distillation -----	B-2
2. Modèles des propriétés thermodynami- ques des mélanges distillés -----	B-8
3. Méthodes de résolution des systèmes d'équations non-linéaires. Méthodes de minimisation des fonctions de plusieurs variables -----	B-13

NOTATIONS EMPLOYEES

Dans tout le travail présenté nous utilisons la convention suivante pour les notations : une matrice est représentée par une lettre majuscule, un vecteur par une lettre minuscule normale, un scalaire par une lettre en italique, une fonction par une lettre grecque soit par exemple A , x , f , ϕ . D'une façon générale $a_{i,j}$ est l'élément i,j de la matrice A , x_i l'élément i du vecteur x . La seule exception est le cas des matrices K_j et EM_j qui sont les matrices dont les éléments diagonaux sont ceux des vecteurs k_j et em_j , et dont les autres termes sont nuls.

Etant donnée la multiplicité des variables mises en jeu, nous avons été amenés à définir plusieurs systèmes de notations, valables respectivement dans le paragraphe 1-2, dans le chapitre IV, et dans le reste du texte. Les notations du paragraphe 1-2 sont définies dans le texte même. Les autres sont définis ci-après.

1 - Notations utilisées dans tout le texte, à l'exception du paragraphe 1-2 et du chapitre IV.

j	Indice repérant la position d'un plateau
$j = 1$: bac de reflux
$j = jt$: fond de colonne
jt	Nombre total de plateaux plus 2
jf	Position du plateau d'alimentation
jl	" " de soutirage latéral (chapitre V)
i	Indice repérant un composant du mélange traité
m	Nombre de composants
p	Pression règnant dans la colonne
f	Débit molaire d'alimentation
fl	" " de la phase liquide de l'alimentation
fv	" " de la phase vapeur de l'alimentation
d	" " de soutirage de tête
b	" " de soutirage de fond
l_j	" " du liquide quittant le plateau j

v_j	Débit molaire de la vapeur quittant le plateau j
vm_j	" " " " arrivant au plateau $j-1$
sl_j	" " du soutirage liquide effectué au plateau j
sv_j	" " " vapeur " " "
lif	" " du liquide arrivant sur le plateau jf
vsf	" " de la vapeur arrivant au plateau $jf - 1$
zf	Vecteur des concentrations molaires globales de l'alimentation
yf	" " " " de la phase liquide de l'alimentation
xf	Vecteur des concentrations molaires de la phase vapeur de l'alimentation
yd	Vecteur des concentrations molaires du soutirage de tête
xb	" " " " " de fond
xl_j	" " " " " latéral
x_j	" " " " de la phase liquide du plateau j
y_j	" " " " " vapeur quittant le plateau j
ym_j	Vecteur des concentrations molaires de la phase vapeur arrivant au plateau $j - 1$
\bar{y}_j	Vecteur des concentrations molaires de la vapeur en équilibre théorique avec x_j
\bar{x}_j	Vecteur des concentrations molaires de la vapeur en équilibre théorique avec y_j
xif	Vecteur des concentrations molaires du liquide arrivant sur le plateau jf
ysf	Vecteur des concentrations molaires de la vapeur arrivant au plateau $jf - 1$
hf	Enthalpie molaire globale de l'alimentation
hvf	" " de la phase vapeur de l'alimentation
hlf	" " " liquide "
hvd	" " du soutirage de tête
hvb	" " " de fond
hw_j	" " de la vapeur de composition y_j
hvm_j	" " " " ym_j
hl_j	" " du liquide " x_j
\overline{hw}_j	" " de la vapeur de composition \bar{y}_j

\overline{hl}_j	Enthalpie molaire du liquide de composition \overline{x}_j
hli_f	" " " arrivant sur le plateau jf
hvs_f	" " de la vapeur arrivant au plateau $jf - 1$
t_j	Température régnant sur le plateau j
K_j	Vecteur des coefficients d'équilibre du plateau j
t_f	Température du fluide d'alimentation
k_f	Vecteur des coefficients d'équilibre du fluide d'alimentation
μ	Fonction vectorielle de p, t, x, y donnant la valeur de k
λ	Fonction de p, t, x , donnant la valeur de hl
ν	" " p, t, y , " " " hw
\hat{x}^t	Vecteur composé de $m-2$ éléments de x correspondant à la température t
$\hat{x}r^t$	Vecteur \hat{x} de référence correspondant à la température t
k^t	Vecteur des coefficients d'équilibre correspondant à p^t, \hat{x}^t, t
kr^t	Vecteur k de référence correspondant à la température t
pr^t	Pression de référence correspondant à la température t
em_j	Vecteur des efficacités relatif aux bilans massiques, pour le plateau j
eh_j	Vecteur des efficacités relatif aux bilans enthalpiques, pour le plateau j
ne	Nombre total de paramètres d'efficacité indépendants considérés
qb	Puissance calorifique fournie à la colonne par le bouilleur
qc	" " " " " le condenseur
a	Vecteur des variables indépendantes
s	" d'entrée de l'algorithme de réduction.
sf	Vecteur d'entrée de la partie commune de l'algorithme de réduction.
u	Vecteur d'itération
w	" d'erreur
as	" composé des éléments communs de a et de s
ae	" " " de a non compris dans s
wm	Partie fondamentale du vecteur d'erreur
we	Partie secondaire " "
na	Nombre d'éléments du vecteur a
ns	" " " s
nsf	" " " sf

nu	Nombre d'éléments du vecteur u			
nw	"	"	"	w
nas	"	"	"	as
nae	"	"	"	ae
num	"	"	"	wm
ic	Indice repérant une concentration supposée connue			
in	"	"	"	" inconnue
ϕ	Fonction d'erreur d'une boucle d'itération			

Remarques :

- Les notations d , b , yd , xb , hvd , hvb représentent respectivement les mêmes variables que les notations v_1 , l_{jt} , y_1 , x_{jt} , w_1 , hl_{jt} . On emploiera indifféremment les unes ou les autres selon leur cohérence avec le reste du calcul.

- Dans le chapitre V un suffixe a , b , c ou d est ajouté à ces notations selon que la variable est relative aux colonnes A, B, C ou D.

2 - Notations employées dans le chapitre IV.

k	Indice repérant l'itération en cours
l	" définissant la dimension des matrices Y^l , P^l , T^l
lb	Nombre de points d'une réalisation de la méthode de Broyden généralisée
n	Nombre d'équations et d'inconnues du système
x_k^x	Valeur du vecteur d'itération à l'itération k
x_k^*	Vecteur d'itération normalisé
f_k	Vecteur d'erreur
\hat{f}_k	Vecteur d'erreur normalisé
RX	Matrice de transformation de x en x^x
RF	Matrice de transformation de f^x en f
v_k	Valeur de ω^x pour x_t^x , de ω pour x_k
Q	Matrice définie positive définissant ω^x
p_k	Vecteur définissant la direction du pas ($x_k - x_{k-1}$)
t_k	Scalaire définissant l'amplitude du pas ($x_k - x_{k-1}$)
y_k	Vecteur différence ($f_k - f_{k-1}$)
A_k	Estimation à l'itération k de la matrice jacobienne $\frac{\partial f}{\partial x}$
H_k	Matrice inverse de A_k

Y_k^L	Matrice formée par juxtaposition des vecteurs $y_k, y_{k-1}, \dots, y_{k-l-1}$
P_k^L	Matrice formée par juxtaposition des vecteurs $p_k, p_{k-1}, \dots, p_{k-l-1}$
T_k^L	Matrice dont les éléments diagonaux sont $t_k, t_{k-1}, \dots, t_{k-l-1}$ et dont les autres termes sont nuls
\bar{p}_i	Variation sur x effectuée dans la méthode de base de calcul de
\bar{y}_i	Variation sur f correspondant à \bar{p}_i .
$P_i^{\bar{y}}$	Matrice formée par juxtaposition des vecteurs $\bar{p}_i, i = 1, n$
$Y_i^{\bar{y}}$	" " " " " $\bar{y}_i, i = 1, n$
s_j	Scalaire définissant l'étape j dans la méthode de Davidenko
n_k^j	Vecteur d'erreur dans la méthode de Davidenko, à l'étape j , à l'itération k
$\alpha_0^j, \alpha_1^j, \alpha_2^j$	Vecteurs coefficients de l'approximation du second ordre de $\chi(s)$ à l'étape j
ϕ^x	Fonction donnant f^x à partir de x^x
ϕ	" " f " x
ω^x	Norme de f^x
ω	Norme de f
η	Forme quadratique (ω^2)
ρ	Fonction introduite dans la méthode de Davidenko
χ	Fonction donnant la solution x de $p(x, s) = 0$ en fonction de s
X_1^j	Approximation du premier ordre de x à l'étape j
X_2^j	" second " "

INTRODUCTION

m + 43 ne

pourquoi être choisis ? (les autres choisis ?)
Sous-œuvre le programme

0-2
Mise fin facile
de ces de lignes

Dans une évolution de caractère général l'ingénieur concepteur de systèmes* tend de plus en plus à poser ses problèmes sous une forme mathématique, appliquant moins son art à la recherche directe et plus ou moins intuitive d'une solution acceptable qu'à la définition et la représentation quantitative précises de ses objectifs et du fonctionnement du procédé commandé, utilisant ensuite des techniques numériques mises en oeuvre sur une machine pour obtenir la valeur des paramètres caractérisant la solution optimale.*

Dans cette approche moderne, la qualité d'une solution est mesurée à l'aide d'un critère de performance, qui doit être rendu extrémal, et le procédé commandé est représenté par une structure mathématique, ou modèle, susceptible de décrire son état en fonction de conditions initiales et de variables d'entrées.

Très souvent le modèle est constitué par un ensemble d'équations algébriques et différentielles, et nous nous intéresserons plus particulièrement au cas où seules sont présentes des équations algébriques, c'est-à-dire celui où le modèle représente les états stationnaires du procédé.

Dans ces conditions, l'état du procédé est alors complètement déterminé par la connaissance de la valeur d'un ensemble de variables indépendantes, ou vecteur indépendant, celle des autres variables (vecteur dépendant) étant calculable par résolution du système d'équations.

L'utilisation pratique du modèle nécessite ainsi qu'on associe, au système d'équations le constituant, une méthode de résolution permettant de calculer le vecteur dépendant en fonction du vecteur indépendant.

Or l'emploi généralisé des modèles mathématiques à diverses fins entraîne que, pour un même procédé, le vecteur indépendant n'a pas toujours la même constitution. Si nous prenons comme exemple le cas où le modèle doit être employé pour :

- a - la conception
- b - l'identification
- c - la recherche des coefficients de sensibilité entrée-sortie
- d - l'optimisation du fonctionnement du système

* Nous entendons ici par système l'ensemble constitué par un procédé commandé et le système de commande qui lui est associé.

Nous constatons en effet que :

- Les paramètres d'adaptation font partie du vecteur dépendant dans le cas b du vecteur indépendant dans les autres cas.
- Les variables de sortie régulées font partie du vecteur dépendant en c du vecteur indépendant dans les autres cas.
- Les variables d'action servant aux régulations font partie du vecteur dépendant en a et d du vecteur indépendant dans les deux autres cas.
- Les autres variables d'action font toujours partie du vecteur indépendant.

Il est ainsi nécessaire, bien que le modèle lui-même reste identique, qu'on dispose, pour chaque configuration du vecteur indépendant, d'une méthode de résolution du système d'équations.

Deux solutions peuvent immédiatement être proposées pour la résolution de ce problème :

- a- L'emploi direct d'une méthode classique de résolution des systèmes d'équations quelconques (voir chapitre IV), qui permet théoriquement d'utiliser un vecteur indépendant de constitution arbitraire.
- b- L'utilisation des propriétés particulières du système d'équations pour élaborer un algorithme spécifique à chaque configuration du vecteur indépendant.

Deux difficultés se présentent cependant dans le cas, très fréquent pour les procédés industriels, où le système d'équations est de grande dimension :

- a- Les méthodes classiques de résolution deviennent, pour des raisons d'encombrement et de temps de calcul sur machine, inutilisables au dessus d'une certaine dimension du système.
- b- Il est souvent impossible de trouver une méthode particulière pour toute constitution du vecteur indépendant.

L'utilisation généralisée du modèle est alors très difficile.

Le problème se pose en ces termes dans le domaine particulier de la distillation où le modèle statique d'une colonne peut comporter jusqu'à plusieurs milliers d'équations. Une revue des méthodes de résolution utilisables pour ce type de procédé (voir chapitre II) montre que certaines des méthodes existantes permettent le choix arbitraire de la

constitution du vecteur indépendant, mais, d'après les auteurs eux-mêmes, nécessitent, en leur état actuel, les plus grosses machines disponibles pour traiter des colonnes de dimension très modeste, et qu'au contraire les méthodes performantes et couramment employées impliquent une constitution unique ou quasi-unique du vecteur indépendant.

Remarquons que, dans le cas où la résolution doit être effectuée avec un vecteur indépendant ne correspondant à aucune des méthodes du second type cité, le problème peut être résolu grâce à une procédure itérative faisant intervenir, à chaque itération, la résolution complétée du système d'équations à l'aide d'une de ces méthodes. Mais il est évident que le temps de calcul correspondant est très long.

De ce qui précède il découle qu'il n'existe pas, jusqu'à présent, de méthode satisfaisante de résolution permettant un emploi généralisé du modèle statique d'une colonne de distillation. C'est précisément cette lacune que nous nous sommes efforcés de combler dans le travail que nous présentons ici.

La méthode recherchée doit présenter, comme caractéristique fondamentale, la possibilité d'employer un vecteur indépendant de constitution quelconque. De plus pour être acceptable et d'emploi général elle doit nécessiter un temps de calcul et un volume de mémoire sur machine restreints, ainsi que permettre la prise en compte de colonnes de structure quelconque.

Deux éléments principaux constituent le travail présenté :

- Nous proposons (chapitre III) une formulation du problème permettant d'élaborer une méthode satisfaisant aux quatre conditions précédentes.

- Nous étudions (chapitre IV) les conditions de mise en oeuvre optimale de celle-ci.

La méthode obtenue^{*} est alors parfaitement opérationnelle .

Précédant cette partie centrale de l'étude, le chapitre I est un

* La méthode proposée dans ce travail a déjà fait l'objet de plusieurs publications partielles effectuées par l'auteur seul ou avec des collaborateurs {D4}, {D5}, {D11}, {D25}

rappel des hypothèses générales et des équations constituant le modèle statique d'une colonne de distillation, et le chapitre II est une revue des méthodes de résolution existantes, dans laquelle chaque type de méthode est confronté avec les critères définis précédemment.

Dans le chapitre V, nous décrivons un exemple d'application de la méthode proposée dans le cadre de l'automatisation d'une unité industrielle de craquage à la vapeur de grande capacité*. Remarquons que c'est au cours de cette étude que se sont présentés les problèmes qui nous ont conduits à l'élaboration de la méthode proposée.

La conclusion, après un rappel des caractéristiques essentielles de la méthode proposée, ouvre la voie à un élargissement de la fonction de l'algorithme, rendu possible par la formulation adoptée, le transformant en un algorithme intégré d'optimisation.

* Cette étude d'automatisation a été effectuée dans le cadre d'un contrat de la Délégation Générale à la Recherche Scientifique et Technique qui réunissait la Société Naphtachimie, à qui appartient l'unité étudiée, la Société Télémécanique Electrique, constructeur du calculateur numérique de commande utilisé, et le Laboratoire d'Automatique de Grenoble, maître d'oeuvre scientifique de l'étude.

CHAPITRE 1

SYSTEME D'EQUATIONS FORMANT

LE MODELE STATIQUE D'UNE COLONNE CONVENTIONNELLE.

Dans cette partie nous indiquons les hypothèses générales concernant la colonne étudiée et nous rappelons les équations constituant le modèle mathématique de la colonne, ainsi que le nombre de degrés de liberté du système.

I-1. HYPOTHESES DE TRAVAIL

Dans l'étude qui suit nous nous proposons d'élaborer le modèle mathématique du fonctionnement statique d'une colonne de distillation, c'est-à-dire que nous ne considérons que les régimes obtenus quand les entrées de commande ont une valeur constante depuis le temps $t = -\infty$.

La colonne de distillation choisie pour décrire la méthode proposée est une colonne à plateaux dont la structure est conventionnelle (figure I-1). Elle comporte une alimentation dans sa partie médiane, un soutirage de tête en phase vapeur, un soutirage de fond en phase liquide, un bouilleur, un condenseur et un reflux en phase liquide effectué sur le premier plateau ($j = 2$).

Le mélange distillé comporte un nombre quelconque de composants, et peut être idéal ou non-idéal. La seule hypothèse impliquée dans les équations du modèle est que chaque composant est complètement soluble dans tous les autres et dans tout mélange des autres.

Nous supposons qu'il n'existe aucun échange thermique entre l'intérieur et l'extérieur de la colonne, ni entre les plateaux si on excepte ceux qui sont spécifiés et ceux résultant des mélanges de flux ayant une enthalpie différente.

De plus dans le but de ne pas surcharger les notations, nous avons, dans les équations qui suivent, supposé que la pression est identique **sur tous les plateaux**. Il est évident qu'aucun problème n'apparaît quand on considère une pression variable le long de la colonne.

Nous avons choisi pour décrire la méthode, le cas d'une colonne conventionnelle parce que c'est celui-ci (très fréquent) qui permet l'analyse la plus fine de l'algorithme proposé, en particulier en ce qui concerne la phase de réduction. Le cas d'une colonne de structure générale conduit (paragraphe III-6.) à un vecteur d'itération de dimension plus importante, mais à une structure plus simple de l'algorithme, et apparaît alors, paradoxalement, comme une simplification par rapport au cas étudié.

1-2. MODELE DES PROPRIETES THERMODYNAMIQUES DU MELANGE DISTILLE

Au cours de l'élaboration du modèle mathématique de la colonne nous serons amenés à utiliser une représentation des phénomènes physiques de base apparaissant au niveau de chaque plateau, c'est-à-dire l'équilibre liquide-vapeur. De plus les bilans enthalpiques nécessitent la connaissance de l'enthalpie des phases en présence. Il est donc indispensable de disposer d'un modèle des propriétés thermodynamiques du mélange distillé.

L'étude complète de ces propriétés et de leur représentation n'entre pas dans le cadre du travail présenté. Nous nous bornons donc à rappeler les méthodes d'approche généralement utilisées pour l'élaboration des modèles thermodynamiques, et à donner les références de méthodes pratiques utilisables dans l'élaboration d'un modèle de colonne.

1-2.1. Equilibres liquide-vapeur.

Il est classique, pour déterminer un équilibre liquide vapeur, d'utiliser les coefficients d'équilibre définis par $k_i = y_i/x_i$. Le nombre total de variables mises en jeu est alors de $3m + 2$, (soit x, y, k, t, p). La règle des phases de Gibbs indique que le nombre de degrés de liberté de l'équilibre liquide-vapeur est égale à m .

Il existe de plus $m+2$ relations immédiates :

$$y_i = k_i \cdot x_i, \quad i = 1, m$$

$$\sum_{i=1}^m y_i = 1$$

$$\sum_{i=1}^m x_i = 1$$

La détermination de la valeur des coefficients d'équilibre en fonction des autres variables, introduisant m équations supplémentaires est donc suffisante pour permettre la détermination de toutes les variables, m variables indépendantes étant supposées connues.

On peut distinguer deux classes de méthodes de calcul des coefficients d'équilibre : celles utilisant la pression de convergence, et celles utilisant les fugacités et les coefficients d'activité.

1-2.1.a Utilisation de la pression de convergence.

Les méthodes de cette classe utilisent la propriété suivante des mélanges en équilibre : si à température constante on fait varier la pression, il existe une valeur de cette dernière appelée pression de convergence, pour laquelle tous les coefficients d'équilibre k_i sont unitaires. A la température critique, cette pression est la pression critique vraie si le mélange est binaire, la pression critique de "l'équivalent binaire" si le mélange est multicomposant.

Il existe plusieurs méthodes, développées principalement par WINN {T22}, HADDEN {T7}, LENOIR et col. {T12}, et par les équipes de la N.G.A.A. {T15} et la N.G.S.M.A. {T16}, permettant de déterminer la pression de convergence des mélanges étudiés, et, à partir de là, les coefficients d'équilibre correspondant à la pression et la température de l'équilibre.

Ces méthodes, purement empiriques, se prêtent difficilement au calcul sur machine, et de plus ne permettent pas la détermination associée d'une valeur des enthalpies qui soit thermodynamiquement cohérente avec celle des coefficients d'équilibre. Ces deux inconvénients font qu'on leur préfère généralement une des méthodes de la seconde catégorie. Nous ne les décrirons donc pas plus en détail.

1-2.1.b Utilisation des fugacités et des coefficients d'activité.

Les méthodes mettant en jeu les fugacités et les coefficients d'activité des composants dans chaque phase utilisent une approche thermodynamique du problème. L'équilibre liquide-vapeur, qui est un cas particulier de l'équilibre multiphasés, est un double équilibre thermodynamique : équilibre thermique et équilibre de phase entre le liquide et la vapeur.

L'application du second principe de la thermodynamique conduit à deux conditions, dont l'ensemble est une condition nécessaire et suffisante d'existence de l'équilibre :

- Le critère d'équilibre thermique implique l'égalité respective des températures et des pressions totales des deux phases.

- Le critère d'équilibre de phase peut être formulé de façon équivalente à partir de plusieurs fonctions thermodynamiques d'état. Pour l'équilibre liquide-vapeur c'est l'emploi de la notion de fugacité qui conduit à la formulation la plus simple. Dans ce cas la condition d'équilibre de phase consiste en l'égalité de la fugacité de chaque composant dans la phase liquide et la phase vapeur.

La fugacité \overline{f}_i^L du composant i en solution dans la phase liquide à la température t et la pression p est définie par l'ensemble des deux relations :

$$(1.1) \quad r.t. \text{Log} \left(\frac{\overline{f}_i^L}{f_{i,0}^L} \right) = \int_{p_0}^p \overline{v}_i dp$$

$$(1.2) \quad (\overline{f}_i^L / x_i p) \rightarrow 1 \quad \text{quand } p \rightarrow 0$$

Remarquons que la fugacité du composant i a la dimension d'une pression. Pour un gaz parfait elle est égale à la pression partielle du composant dans le mélange. Pour un équilibre idéal entre deux phases idéales l'approche utilisée (égalité des fugacités) est équivalente à l'application des lois de RAULT et de DALTON.

L'ensemble (1.1), (1.2) est équivalent à :

$$(1.3) \quad r.t. \text{Log} \left(\overline{f}_i^L / p \right) = \int_{p_0}^p \left(\overline{v}_i - \frac{rt}{p} \right) dp$$

ou encore à

$$(1.4) \quad r.t. \text{Log} \left(\frac{\overline{f}_i^L}{x_i \cdot f_i^L} \right) = \int_{p_0}^p (\overline{v}_i - v_i) dp$$

avec \overline{v}_i : volume molaire partiel du composant i en solution.

- v_i : volume molaire partiel du composant i pur dans les mêmes conditions de température et pression, dans la même phase. (Cet état peut être hypothétique)
- f_i^l : fugacité du composant i liquide dans les conditions de définition de v_i .
- $\overline{f_{i,0}^l}$: fugacité du composant i en solution, à la pression p_0 . Dans les équations (1.3) et (1.4) p_0 est supposée suffisamment faible pour que la solution soit idéale à cette pression, de même que dans tout ce qui suit.

Ces relations de même que les suivantes peuvent aussi être écrites pour la phase vapeur, en changeant x_i en y_i et les indices supérieurs l en v .

La relation (1.4) peut s'écrire :

$$(1.5) \quad \overline{f_i^l} = \gamma_i^l \cdot x_i \cdot f_i^l$$

où γ_i^l est le coefficient d'activité du composant i en phase liquide, défini par :

$$(1.6) \quad r.t. \text{Log } \gamma_i^l = \int_{p_0}^p (\overline{v}_i - v_i) dp$$

Dans ces conditions, l'application du critère d'équilibre de phase conduit à la relation :

$$(1.7) \quad \overline{f_i^l} = \gamma_i^l \cdot x_i \cdot f_i^l = \overline{f_i^v} = \gamma_i^v \cdot y_i \cdot f_i^v$$

d'où

$$(1.8) \quad k_i = y_i/x_i = \frac{\gamma_i^l \cdot f_i^l}{\gamma_i^v \cdot f_i^v}$$

La détermination de k_i nécessite donc celle des 4 termes apparaissant dans le membre de droite de (1.8). Pour un composant pur l'équation (1.3) devient :

$$(1.9) \quad r.t. \text{Log } (f_i^l/p) = \int_{p_0}^p (v_i - \frac{rt}{p}) dp$$

La fugacité du composant i pur dans les deux phases sont généralement calculées à partir de l'équation (1.9), en utilisant la loi des états correspondants ou une équation d'état. La première méthode est basée sur la propriété qu'a le coefficient de compressibilité $z_i = (p.v_i)/(r.t)$ d'un élément i d'une famille de corps voisins, de pouvoir être exprimé en fonction de sa température réduite $tr_i = t/tc_i$, de sa pression réduite $pr_i = p/pc_i$ et de son coefficient de compressibilité critique $zc_i = pc_i.vc_i/r_i.tc_i$, où tc_i et pc_i sont sa température et sa pression critiques.

La fugacité est alors donnée par la relation suivante dérivée de (1.9) :

$$(1.10) \quad \text{Log } (f_i^l/p) = \int_{p_0}^{pr_i} (z_i - 1) \frac{d pr_i}{pr_i} \quad (\text{ou } \text{Log } (f_i^v/p))$$

Il existe des tables ou des abaques {T9} , {T15} , des relations {T2} , {T9} , établies sur la base de résultats expérimentaux, donnant directement f_i^l/p en fonction de pr_i , tr_i et zc_i . Remarquons que dans le cas où l'état du composant i pur est hypothétique, ces résultats ne peuvent pas être employés directement, et diverses méthodes d'extrapolation peuvent alors être utilisées telles, par exemple, que celles proposées par LEWIS et KAY {T13} ou par SOUDER, SELHEIMER et BROWN {T20}.

On peut au contraire utiliser une équation d'état pour intégrer la relation (1.9) et obtenir la valeur des fugacités f_i^l et f_i^v . Les équations d'état sont en général de la forme, pour le composant i :

$$p = \phi(t, v_i)$$

Les plus utilisées sont celles proposées par VAN DER WAAL {T10} , BEATTIE et BRIDGEMAN {T10} , REDLICH et KWONG {T18}, BENEDICT, WEBB et RUBIN {T1} . Notons que dans le cas du calcul des fugacités à l'aide d'une équation d'état, les états hypothétiques sont traités par emploi de l'équation dans une zone à laquelle ne correspond pas un état réel.

Le calcul des coefficients d'activités des deux phases peut également être effectué de deux façons différentes. On peut tout d'abord utiliser la relation (1.6) qu'on intègre à l'aide d'une équation d'état. Le domaine de validité de celle-ci doit, dans ce cas, être étendu aux mélanges. Des coefficients relatifs au mélange sont calculés à partir de ceux, connus,

relatifs aux corps purs, à l'aide d'une loi de composition qui est en général spécifique à chaque coefficient. Le volume molaire partiel est alors obtenu par dérivation partielle de l'équation relative au mélange.

Une approche totalement différente de la précédente peut être employée pour calculer les coefficients d'activité. Basée sur la théorie statistique de la thermodynamique, elle envisage les probabilités de voisinage des différentes molécules pour déterminer l'excès d'énergie libre provoqué par le passage en solution des composants séparés {T10}. Les méthodes de ce type sont principalement celles proposées par VAN LAAR {T8} , MARGULES {T8} , SATCHARD et HAMER {T8} , valables pour les mélanges binaires, qui sont des cas particuliers de la méthode généralisée de WOHL {T23} , et celle proposée par REDLICH et KISTER {T18} qui est valable pour les mélanges multicomposants. CHAO et SEADER {T2} utilisent aussi une méthode de ce type, basée sur l'équation de HILDEBRAND.

Les valeurs numériques des paramètres apparaissant dans ces différentes méthodes sont déterminées à partir de données expérimentales, et il s'agit d'un travail assez long. Plusieurs équipes de recherche ont publié des méthodes complètes de calcul des coefficients d'équilibre accompagnées de la valeur des paramètres correspondant à un ensemble de corps usuels rencontrés en distillation. Pour les hydrocarbures par exemple les principales sont celles de BENEDICT, WEBB et RUBIN {T17} , de CHAO et SEADER {T2} , {T6} de CHUEH et PRAUSNITZ {T3} et plus récemment de ZUDKEVITCH {T11} . Nous indiquons dans le tableau 1.1 quelles méthodes particulières chacune d'elles emploie.

Dans l'élaboration du modèle de la colonne nous supposerons qu'on sait déterminer les coefficients d'équilibre, par une des méthodes citée, ou par toute autre, et que leur valeur est donnée par une relation de la forme :

$$(1-11) \quad k_i = \mu_i(p, t, x, y)$$

1-2.2. Enthalpie des phase liquide et vapeur du mélange distillé.

Nous cherchons à obtenir la valeur de l'enthalpie molaire h de chaque phase en fonction de la température, la pression et la composition de cette phase. L'équation reliant h à la température et la pression est la suivante :

$$(1.12) \quad dh = cp \cdot dt - \left[t \cdot \left(\frac{\partial v}{\partial t} \right)_p - v \right] dp$$

dans laquelle cp est la capacité calorifique molaire à pression constante du fluide étudié.

L'enthalpie h étant définie à une constante près, on peut choisir arbitrairement $h = 0$ pour les conditions $t = t_0$, $p = 0$. De plus h est une fonction d'état ; le chemin d'intégration peut donc être quelconque. Choisissons l'intégration sur t d'abord, sur p ensuite. On obtient :

$$(1-13) \quad h_0 = \int_{t_0}^t (cp)_{p=0} dt$$

$$(1-14) \quad h = h_0 - \int_0^p \left[t \cdot \left(\frac{\partial v}{\partial t} \right)_p - v \right] dp$$

A pression nulle h_0 peut être exprimé en fonction des enthalpies des constituants dans les mêmes conditions à l'aide de la relation

$$(1-15) \quad h_0 = \sum_{i=1}^c x_i \cdot h_{i,0}$$

avec

$$(1-16) \quad h_{i,0} = \int_{t_0}^t (cp_i)_{p=0} dt$$

On connaît en général {T9} ,{T14} pour chaque corps pur une estimation directe de $h_{i,0}$ qu'on peut mettre sous la forme d'un développement polynomial limité en t . La valeur de h_0 est donc calculable aisément dans tous les cas.

Si on dispose d'une équation d'état susceptible de représenter le mélange, le calcul de l'enthalpie h peut être effectué à l'aide de l'équation (1-14). Dans le cas contraire on pourra utiliser l'équation

suivante, équivalente à (I-14), mais où l'intégration sur p est effectuée séparément sur chaque composant en solution, et qui fait intervenir les fugacités :

$$(I-17) \quad \bar{h}_i - h_{i,0} = r \cdot t^2 \left(\frac{\partial \text{Log} \bar{f}_i}{\partial t} \right)_{p, x_i}$$

Nous avons vu dans le paragraphe I-3.1. diverses méthodes permettant le calcul de γ_i et f_i d'où, à l'aide de la relation (I-5), \bar{f}_i . La dérivation partielle de l'expression donnant \bar{f}_i permet, d'après (I-17), d'obtenir l'enthalpie partielle \bar{h}_i , d'où la valeur de h par sommation.

$$(I-18) \quad h = \sum_{i=1}^m \bar{h}_i \cdot x_i$$

Dans le cas de l'utilisation de ces calculs pour l'élaboration d'un modèle de colonne, on remarquera que tous les mélanges dont on aura à calculer l'enthalpie se trouvent dans les conditions d'équilibre. Il apparaît alors intéressant d'utiliser la même base pour le calcul des coefficients d'équilibre et des enthalpies, comme le proposent, par exemple, ORYE {T17} pour la méthode de B.W.R., WATERMAN et FRAZIER {T21} pour celle de CHAO et SEADER, ceci pour deux raisons :

- La représentation de toutes les propriétés thermodynamiques du mélange est cohérente.

- Un seul ensemble de sous-programmes est nécessaire pour le calcul des coefficients d'équilibre et des enthalpies, et de plus si ce calcul est simultanée, une seule évaluation des fugacités ou des paramètres de l'équation d'état correspondant au mélange est effectuée. Il en résulte un temps de calcul et un volume de mémoire réduits.

Au cours de l'élaboration du modèle de la colonne, nous supposons que nous savons calculer les enthalpies des deux phases du mélange étudié, et qu'elles sont données par des relations du type :

$$(I-19) \quad h_l = \lambda(p, t, x)$$

$$(I-20) \quad h_v = v(p, t, y)$$

1-3. MISE EN EQUATIONS DU MODELE DE LA COLONNE.

Il existe diverses formulations {D15}, {D16}, {D31} des équations représentant le fonctionnement de la colonne étudiée qui diffèrent en particulier dans la façon d'établir les bilans matériels et enthalpiques, mais qui conduisent à des systèmes d'équations équivalents.

Nous avons retenu le mode d'écriture convenant le mieux pour la mise en oeuvre de la méthode proposée. Le modèle est alors constitué par sept groupes d'équations caractéristiques des différentes propriétés du fonctionnement de la colonne.

1-3.1. Bilans matériels.

La stabilité supposée du régime de fonctionnement implique l'égalité des débits molaires, globaux et par composant, entrant et sortant de la colonne complète, ou de toute partie de la colonne.

On effectuera successivement les bilans matériels, global et par composant, de la colonne entière, de la section limitée inférieurement par le plateau j , pour chaque plateau de la section supérieure, de la section de colonne limitée supérieurement par le plateau j , pour chaque plateau de la section inférieure (voir sur les figures 1.2.a et 1.2.b). On obtient les équations suivantes :

- Bilan matériel de la colonne complète

$$(1-21) \quad f = d + b$$

$$(1-22) \quad f \cdot z_f = d \cdot y_d + b \cdot x_b$$

- Bilan matériel de la section comprise entre la tête et le plateau j

$$(1-23) \quad v_j = l_{j-1} + d$$

$$(1-24) \quad v_j \cdot y_j = l_{j-1} \cdot x_{j-1} + d \cdot y_d$$

$$\left. \begin{array}{l} (1-23) \\ (1-24) \end{array} \right\} \quad j = 2, (jf-1)$$

- Bilan matériel de la section comprise entre le fond et le plateau j

$$(1-25) \quad l_j = v_{j+1} + d$$

$$(1-26) \quad l_j \cdot x_j = v_{j+1} \cdot y_{j+1} + b \cdot x_b$$

$$\left. \begin{array}{l} (1-25) \\ (1-26) \end{array} \right\} \quad j = jf, jt-1$$

Le cas du plateau d'alimentation sera étudié à part (1-3.7)

1-3.2. Bilans enthalpiques.

Du fait de l'absence de transferts thermiques parasites, les bilans enthalpiques seront effectués selon un mode analogue à celui employé pour les bilans matériels. On obtient les équations suivantes

- Bilan enthalpique de la colonne complète.

$$(1-27) \quad f \cdot hf + qc + qb = d \cdot hwd + b \cdot hlb$$

- Bilan enthalpique de la section comprise entre la tête et le plateau j

$$(1-28) \quad v_j \cdot hv_j + qc = l_{j-1} \cdot hl_{j-1} + d \cdot hwd \quad j = 2, jf-1$$

- Bilan enthalpique de la section comprise entre le fond et le plateau j

$$(1-29) \quad l_j \cdot hl_j + qb = v_{j+1} \cdot hv_{j+1} + b \cdot hlb \quad j = jf, jt-1$$

1-3.3. Equilibres liquide-vapeur.

Du fait de la définition retenue pour les efficacités (voir 1-4.5) et du mode de résolution employé (III-3.1, III-3.2) nous sommes amenés à utiliser deux écritures différentes selon que le plateau j fait partie de la section supérieure ou de la section inférieure. Les équations données ci-après découlent de ce qui a été dit dans le paragraphe 1-3.1.

- plateau j de la section supérieure

$$(1-30) \quad y_j = k_j \cdot \overline{x_j}$$

$$(1-31) \quad k_j = \mu(p, t_j, \overline{x_j}, y_j)$$

$$(1-32) \quad \sum_{i=1}^m \overline{x_{i,j}} = 1$$

$$j = 1, (jf-1)$$

- plateau j de la section inférieure

$$\begin{array}{l}
 (1-33) \quad \bar{y}_j = k_j \cdot x_j \\
 (1-34) \quad k_j = \mu(p, t_j, x_j, \bar{y}_j) \\
 (1-35) \quad \sum_{i=1}^m \bar{y}_{i,j} = 1
 \end{array}
 \left. \vphantom{\begin{array}{l} (1-33) \\ (1-34) \\ (1-35) \end{array}} \right\} j = jf, jt$$

1-3.4 Enthalpie.

Les enthalpies des différents flux de liquide et de vapeur sont calculées d'après les relations (1-19) et (1-20). Pour la même raison que dans le cas des équilibres, deux écritures différentes sont utilisées suivant que le plateau j fait partie des section supérieure ou inférieure.

Les relations obtenues sont les suivantes :

- plateau j de la section supérieure

$$\begin{array}{l}
 (1-36) \quad hw_j = v(p, t_j, y_j) \\
 (1-37) \quad \bar{hl}_j = \lambda(p, t_j, \bar{x}_j)
 \end{array}
 \left. \vphantom{\begin{array}{l} (1-36) \\ (1-37) \end{array}} \right\} j = 1, jf-1$$

- plateau j de la section inférieure

$$\begin{array}{l}
 (1-38) \quad \bar{hw}_j = v(p, t_j, \bar{y}_j) \\
 (1-39) \quad hl_j = \lambda(p, t_j, x_j)
 \end{array}
 \left. \vphantom{\begin{array}{l} (1-38) \\ (1-39) \end{array}} \right\} j = jf, jt$$

1-3.5. Efficacités des plateaux.

La notion d'efficacité est introduite pour rendre compte d'une part du comportement réel des plateaux, sur lesquels l'équilibre liquide vapeur n'est jamais parfait, d'autre part d'écart éventuels entre les propriétés thermodynamiques réelles et prédites du mélange distillé.

Deux types de représentation sont très employées :

- MURPHREE {D22} a proposé l'emploi de coefficients d'efficacité définis par la relation :

$$e_{i,j} = (y_{i,j} - y_{i,j+1}) / (\bar{y}_{i,j} - y_{i,j+1})$$

dans laquelle \bar{y}_j est la concentration de la vapeur en équilibre avec le liquide de composition x_j .

- HOLLAND et col. utilisent les coefficients d'efficacité de vaporisation défini par la relation :

$$e_{i,j} = y_{i,j} / k_{i,j} \cdot x_{i,j}$$

Remarquons que, par leur nature même, la première définition est plus apte à représenter la non-idéalité des plateaux, alors que la seconde permet plus facilement de corriger une erreur faite dans la prédiction des coefficients d'équilibre.

L'emploi de l'une ou l'autre de ces deux définitions est également compatible avec la méthode de calcul de colonne présentée, de même que leur combinaison, comme nous le verrons dans les applications traitées. Dans la suite de ce travail, nous employons la définition de MURPHREE, sous sa forme normale pour la section inférieure, sous une forme modifiée pour la section supérieure, de façon à simplifier les calculs. Les équations sont les suivantes :

- Section supérieure

$$(1-40) \quad x_1 = \bar{x}_1$$

$$(1-41) \quad x_j = x_{j-1} + EM_j (\bar{x}_j - x_{j-1}) \quad j = 2, (jf-1)$$

- Section inférieure

$$(1-42) \quad y_{jt} = \bar{y}_{jt}$$

$$(1-43) \quad y_j = y_{j+1} + EM_j \cdot (\bar{y}_j - y_{j+1}) \quad j = jf, (jt-1)$$

où \bar{x}_j et \bar{y}_j sont les concentrations du liquide et de la vapeur respectivement en équilibre théorique avec la vapeur y_j et le liquide x_j .

Le même type de relation est employé pour la détermination des enthalpies des phases dont les concentrations ont été modifiées par l'introduction des coefficients d'efficacité, soit :

- Section supérieure

$$(I-44) \quad hl_1 = \overline{hl}_1$$

$$(I-45) \quad hl_j = hl_{j-1} + eh_j(\overline{hl}_j - hl_{j-1}) \quad j = 2, (jf - 1)$$

- Section inférieure

$$(I-46) \quad hw_{jt} = \overline{hw}_{jt}$$

$$(I-47) \quad hw_j = hw_{j+1} + eh_j(\overline{hw}_j - hw_{j+1}) \quad j = jf, (jt - 1)$$

où \overline{hl}_j et \overline{hw}_j sont les enthalpies du liquide \overline{x}_j et de la vapeur \overline{y}_j .

Pour les plateaux 1 et jt , afin de ne pas faire apparaître un indice j de valeur incorrecte, les équations normales doivent être remplacées par les équations (I-40), (I-42), (I-44), (I-46).

De plus les relations (I-41) et (I-43) fournissent des concentrations dont la somme, si les coefficients em_{ij} sont quelconques, n'est pas unitaire. Une relation doit donc exister pour chaque j , entre les

éléments em_{ij} , $i=1, m$, telle que $\sum_{i=1}^m y_{ij} = 1$ ou $\sum_{i=1}^m x_{ij} = 1$. Dans la

suite, nous supposons toujours que la valeur des coefficients em_{ij} a été choisie de telle façon que cette condition soit réalisée.

Dans ces conditions il existe seulement $(jt-2)(m-1)$ valeurs indépendantes em_{ij} et $(jt-2)$ valeurs indépendantes eh_j . Dans la mesure où il est très rare qu'on dispose d'une connaissance suffisante de la colonne pour fixer la valeur d'autant de paramètres, on introduit des relations supplémentaires, du type $em_{i1,j1} = em_{i2,j2}$ par exemple, ce qui réduit le nombre de degrés de liberté. Dans la suite nous supposerons que le nombre total de paramètres d'efficacité indépendant est égal à ne .

I-3.6. Etat du flux d'alimentation.

La première relation existant entre les variables définissant l'état de l'alimentation est la relation de sommation suivante :

$$(I-48) \quad \sum_{i=1}^m z f_i = 1$$

Pour les autres équations il convient de distinguer trois cas pouvant exister : le flux d'alimentation est composé de liquide seul, de vapeur seule, ou comporte deux phases en équilibre. Nous donnons pour chacun de ces cas les équations correspondantes :

- Alimentation en phase liquide

$$(I-49) \quad f_l = f$$

$$(I-50) \quad f_v = 0$$

$$(I-51) \quad x_f = z_f$$

$$(I-52) \quad h_{lf} = h_f$$

- Alimentation en phase vapeur

$$(I-53) \quad f_l = 0$$

$$(I-54) \quad f_v = f$$

$$(I-55) \quad y_f = z_f$$

$$(I-56) \quad h_{vf} = h_f$$

- Alimentation comportant les deux phases en équilibre

$$(I-57) \quad f = f_l + f_v$$

$$(I-58) \quad f \cdot z_f = f_l \cdot x_f + f_v \cdot y_f$$

$$(I-59) \quad K_f \cdot x_f = y_f$$

$$(I-60) \quad k_f = \mu(p, t_f, x_f, y_f)$$

$$(I-61) \quad \sum_{i=1}^m y_f i - \sum_{i=1}^m x_f i = 0$$

$$(I-62) \quad f \cdot h_f = f_l \cdot h_{lf} + f_v \cdot h_{vf}$$

$$(I-63) \quad h_{lf} = \lambda(p, t_f, x_f)$$

$$(I-64) \quad h_{vf} = \nu(p, t_f, y_f)$$

I-3.7. Plateau d'alimentation.

Le plateau d'alimentation est représenté sur la figure I.3, où on peut voir la signification des diverses notations employées.

Des bilans matériels, globaux et par composant, et des bilans enthalpiques conduisent aux équations suivantes :

$$(I-65) \quad vsf = l_{jf-1} + d$$

$$(I-66) \quad vsf \cdot ysf = l_{jf-1} \cdot x_{jf-1} + d \cdot yd$$

$$(I-67) \quad vsf \cdot hvsf = l_{jf-1} \cdot hl_{jf-1} + d \cdot hvd$$

$$(I-68) \quad vsf = v_{jf} + fv$$

$$(I-69) \quad vsf \cdot ysf = v_{jf} \cdot y_{jf} + fv \cdot yf$$

$$(I-70) \quad vsf \cdot hvsf = v_{jf} \cdot hv_{jf} + fv \cdot hvf$$

$$(I-71) \quad lif = v_{jf} + b$$

$$(I-72) \quad lif \cdot xif = v_{jf} \cdot y_{jf} + b \cdot xb$$

$$(I-73) \quad lif \cdot hlif = v_{jf} \cdot hv_{jf} + b \cdot hlb$$

$$(I-74) \quad lif = l_{jf-1} + fl$$

$$(I-75) \quad lif \cdot xif = l_{jf-1} \cdot x_{jf-1} + fl \cdot xf$$

$$(I-76) \quad lif \cdot hlif = l_{jf-1} \cdot hl_{jf-1} + fl \cdot hlf$$

Ces relations sont au nombre de $(4m + 8)$, mais nous allons voir que, combinées aux précédentes elles comportent des redondances. Supposons en effet que les équations (I-65) à (I-73), (I-21), (I-22), (I-27), (I-57), (I-58), (I-62) soient satisfaites, il est aisé de montrer que les équations (I-74) à (I-76) le sont alors nécessairement: La combinaison de (I-65), (I-21), (I-68) conduit à

$$v_{jf} + fv = l_{j-1} + f - b$$

En utilisant (I-71) et (I-57) on obtient alors la relation

$$lif - b = l_{jf-1} + fl - b$$

qui est équivalente à (I-74). La même démarche peut être faite pour montrer que (I-66), (I-22), (I-69), (I-72) et (I-58) entraînent (I-75), et que (I-67), (I-27), (I-70), (I-73), (I-62) entraînent (I-76).

Dans ces conditions le groupe d'équations (1-65) à (1-76) est équivalent à $(3m + 6)$ relations. Nous avons cependant gardé cette écriture redondante parce qu'elle sera utile au cours de la résolution (voir paragraphe III-3.4).

1-4. VARIABLES INDEPENDANTES, VARIABLES DEPENDANTES.

D'après ce qui précède, le modèle théorique de la colonne est constitué d'un système de $jt(4m + 6) + 5m + 10$ équations non linéaires mettant en jeu $jt(4m + 6) + 6m + 14 + ne$ variables.

L'excès du nombre de variables par rapport au nombre d'équations définit le nombre de degrés de liberté du système, c'est-à-dire le nombre de variables indépendantes qu'il faut fixer pour qu'il soit entièrement déterminé. Pour la colonne étudiée le nombre d'éléments na du vecteur indépendant a est ainsi égal à :

$$(1-77) \quad na = m + 4 + ne$$

Il est aisé de vérifier cette relation dans le cas où par exemple le vecteur indépendant est constitué par les variables d'efficacité et les variables d'entrée de la commande, soit :

$$EM, EH, p, f, hf, (zf_i, i = 1, m-1), lx, qb$$

Remarquons que tout ensemble de na variables ne peut pas servir de vecteur indépendant, certains groupes d'équations qui ne font pas intervenir toutes les variables créant des restrictions dans l'espace des variables. C'est le cas par exemple de la relation de sommation (1-48) qui entraîne que tous les éléments de zf ne peuvent pas faire partie simultanément du vecteur indépendant.

Méthode de calcul des coefficients d'équilibre liquide vapeur dans le cas de mélanges d'hydrocarbures.

	Phase vapeur	Phase liquide
B. W. R.	Equation d'état de B. W. R.	Equation d'état de B. W.R.
CHAO et SEADER	Equation d'état de REDLICH KWONG	loi des états correspondants Equation de HILDEBRAND
CHUEH et PRAUSNITZ	Equation d'état de REDLICH KWONG modifiée	Equation de VAN LAAR généralisée Equation de REDLICH-KWONG modifiée Lois des états correspondants
ZUDKEVITCH	Equation d'état de REDLICH KWONG modifiée	Equation d'état de REDLICH KWONG modifiée.

Tableau I.1

Schéma de la colonne conventionnelle étudiée

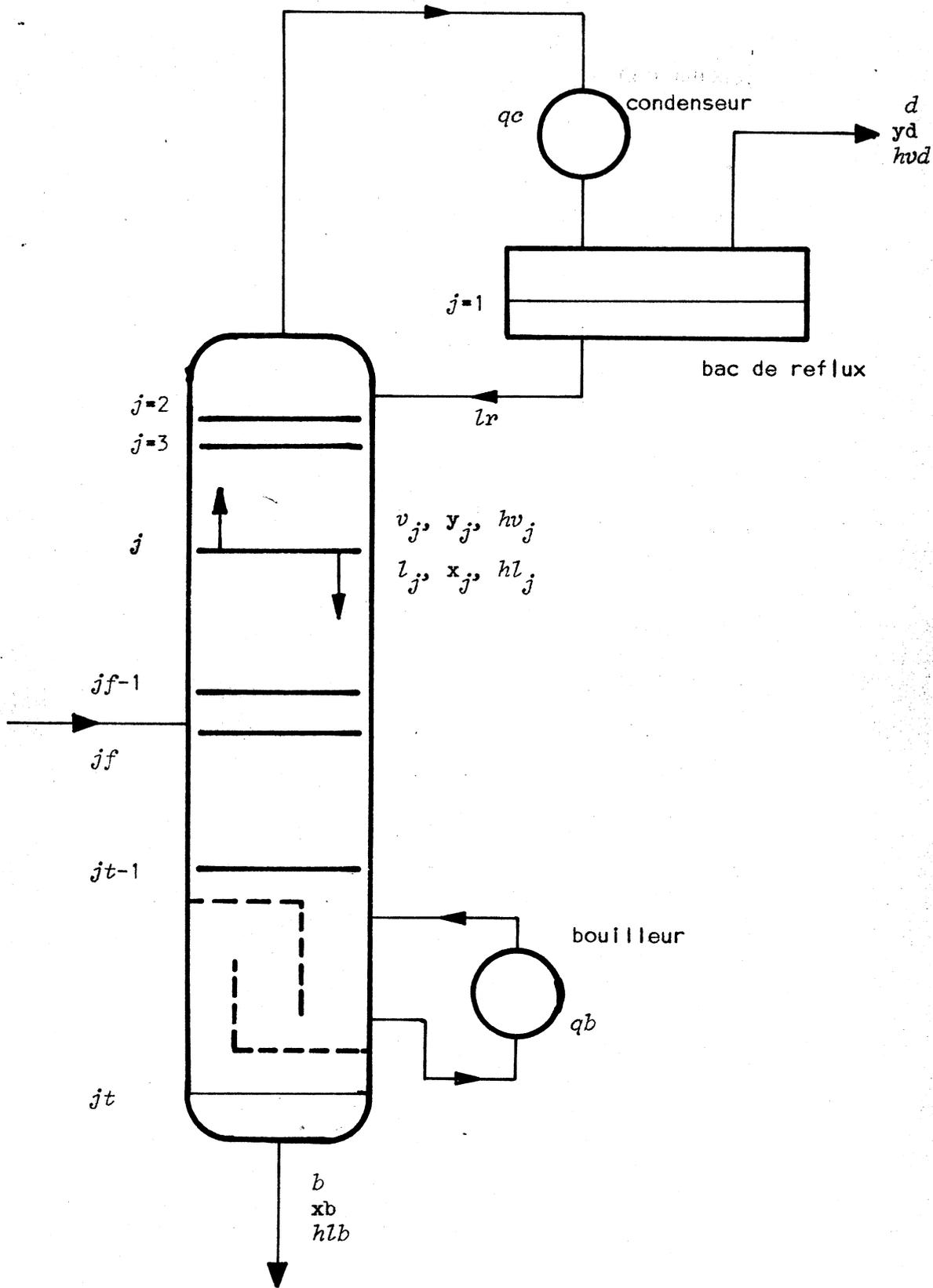


Figure 1.1

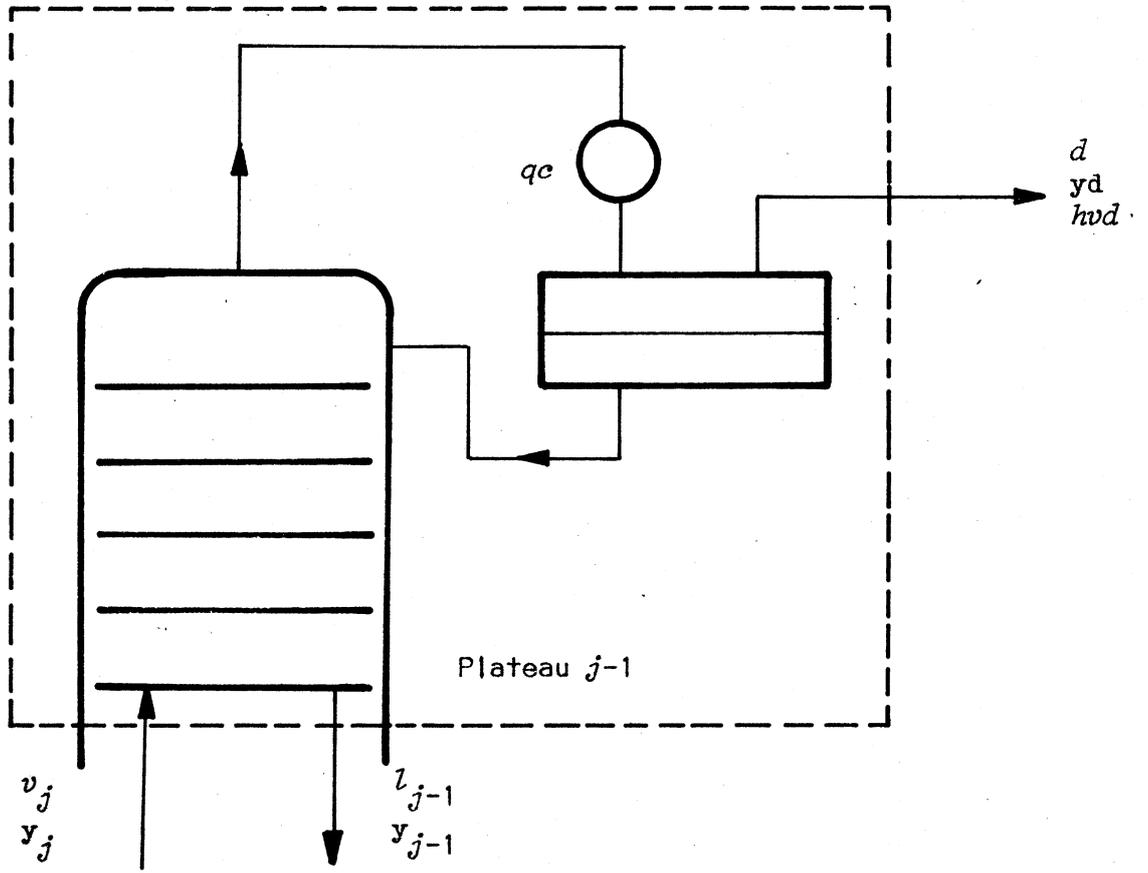


Figure 1.2.a

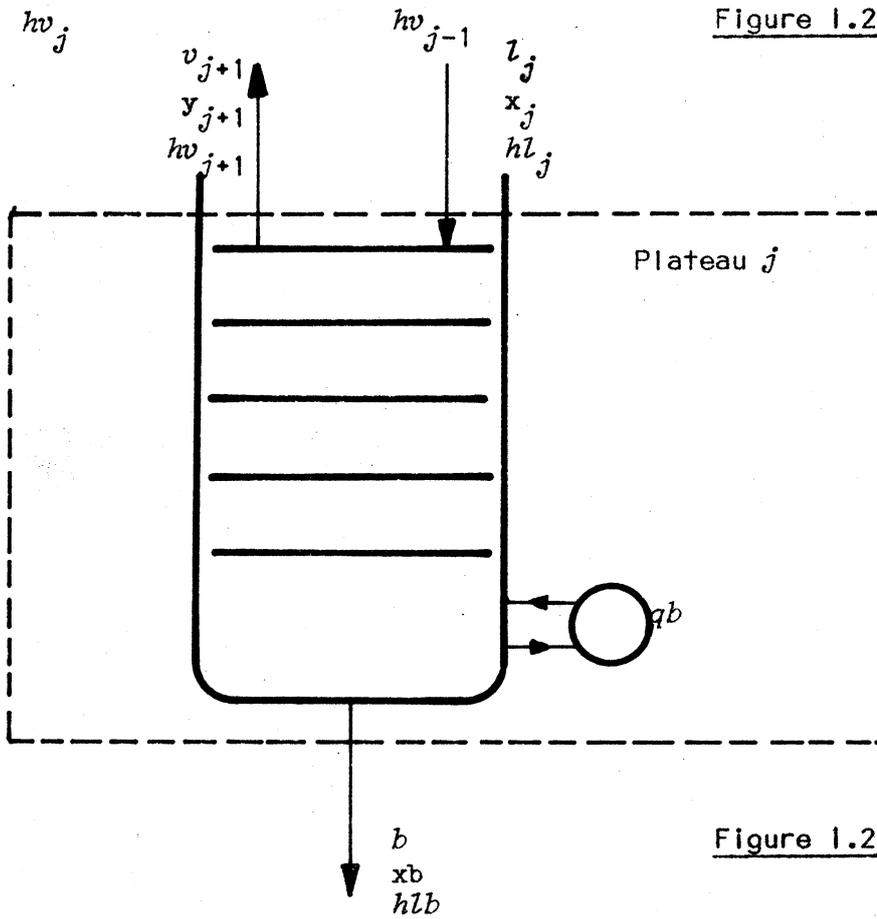


Figure 1.2.b

Plateau d'alimentation.

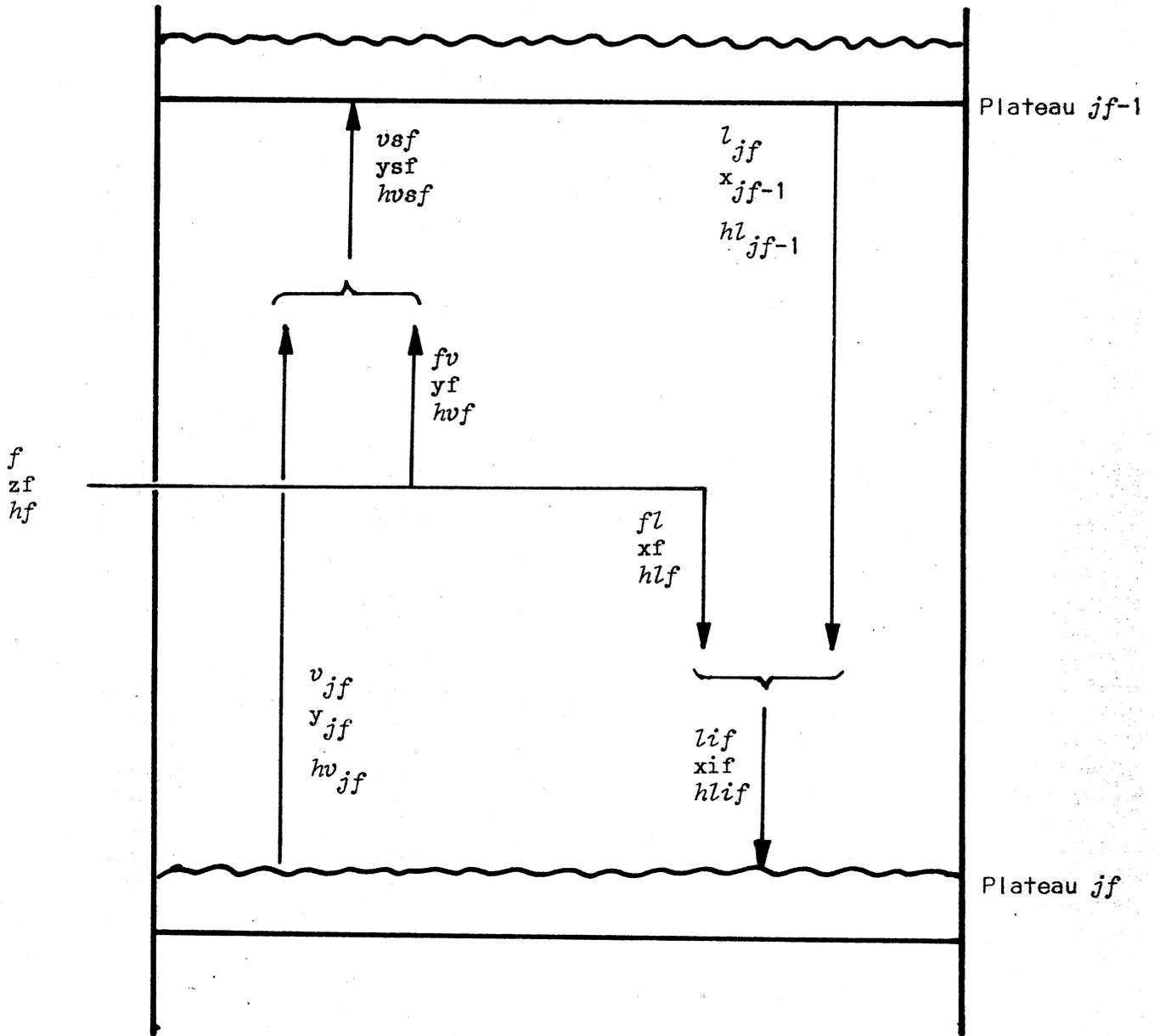


Figure 1.3

CHAPITRE II

METHODES DE RESOLUTION EXISTANTES

Nous rappelons dans ce chapitre les principales méthodes de résolution existantes, en faisant ressortir leurs caractéristiques vis à vis des quatre critères définis dans l'introduction. Parmi elles, on peut distinguer quatre grandes classes de méthodes que nous décrivons successivement.

11-1. METHODES DE THIELE ET GEDDES.

11-1.1. Algorithme de base.

L'algorithme de base proposé initialement par THIELE et GEDDES [D28], représenté sur la figure 11.1 est à itération directe. Si on suppose connue une première estimation des températures et des débits liquides ($t_j, l_j, j=1, jt$), son déroulement est le suivant :

1. Calcul approché des coefficients d'équilibre à partir des températures seulement (en supposant par exemple que les coefficients d'activité sont unitaires).
2. Résolution des équations de bilan matériel, pour obtenir $v_j, x_j, y_j, j=1, jt$.
3. Test : $\sum_{i=1}^m x_{i,j} = 1, j=1, jt$? Non : cas 1, continuer en 4, oui : cas 2, aller en 5.

4. Normalisation des concentrations : $x_{i,j} = \frac{x_{i,j}}{\sum_{n=1}^m x_{n,j}} \quad i=1, m, j=1, jt$

5. Point d'ébullition sur chaque plateau, qui fournit $k_j, t_j, hl_j, hw_j, j=1, jt$.

6. Résolution des équations de bilan enthalpique, qui fournissent $l_j, j=1, jt$.

7. Test : cas 2 ? non : reprendre le calcul en 2, oui : continuer en 8.

8. Test : $k_j = k_j$ précédent, $j=1, jt?$ non : reprendre le calcul en 2, oui : continuer en 9.
9. Test : $l_j = l_j$ précédent, $j=1, jt?$ non : reprendre le calcul en 2, oui : fin.

Remarque : Bien que théoriquement les tests 3, 8 et 9 doivent être effectués pour qu'on puisse affirmer que la solution est atteinte, en pratique, le premier est généralement suffisant.

Au pas 2 de cette procédure, les concentrations correspondant à un composant i sont solution d'un système d'équations linéaires. Après la méthode originale de résolution {D28}, {D14}, et celle proposée par DONNEL et TURBIN {D10}, sont apparues des méthodes matricielles, proposées par AMUNDSON et POTINEN {D1}, WANG et HENKE {D31} en particulier, qui constituent actuellement la solution la plus élégante pour la résolution de ce système. Au pas 6, les débits sont solution d'un système de même nature et les mêmes méthodes de résolution peuvent être employées.

11-1.2. Convergence.

La procédure a été décrite plus haut associée au mode de convergence le plus simple : la transformation effectuée sur les concentrations est une normalisation simple. Une variante ayant des propriétés assez proches est celle proposée par SARGENT {D27}, dans laquelle les concentrations et les débits sont corrigés dans deux boucles d'itération imbriquées.

Les procédures précédentes sont simples et générales, mais présentent une certaine insécurité de convergence. D'autres méthodes de convergence ont été proposées, parmi lesquelles la plus utilisée est sans doute la méthode θ de HOLLAND et col. {D20}, {D15}, qui conduit généralement à une convergence rapide. Dans cette méthode, la correction de y_d et x_b du pas 4 est effectuée de telle façon que le bilan matériel de la colonne complète reste satisfait en même temps qu'on obtient des sommes unitaires pour y_d et x_b . La normalisation des autres concentrations peut être déduite de diverses façons de ces nouvelles valeurs {D15}.

Deux autres méthodes de convergence ont aussi été proposées, qui ne sont utilisables pratiquement que dans le cas où les coefficients

d'équilibre ne dépendent pas des concentrations. Toutes deux font appel à la méthode de NEWTON. Celle proposée par BOYNTON {D6} comporte deux boucles imbriquées dont les vecteurs d'itération sont respectivement l'ensemble des débits liquides et celui des températures, et nécessite l'inversion d'une matrice de dimension jt à chaque itération. Celle proposée par TOMICH {D29} ne comporte au contraire qu'une seule boucle dont le vecteur d'itération est la réunion des deux précédents, et nécessite une seule inversion d'une matrice de dimension $2jt$, grâce à l'emploi de la méthode de BROYDEN {M3}.

11-1.3. Caractéristiques de ces méthodes.

La méthode de base et celle de HOLLAND sont simples et peu encombrantes. La première, très générale vis à vis de la structure de la colonne n'est cependant pas très sûre. La seconde au contraire est l'une des plus rapides, mais, bien que les colonnes complexes puissent être prises en compte, elle s'alourdit sensiblement quand plusieurs soutirages latéraux apparaissent.

Les méthodes de BOYNTON et de TOMICH sont générales vis à vis de la structure de la colonne et paraissent de convergence assez sûre. Elles sont par contre encombrantes, surtout la seconde, et la première est souvent très lente. De plus elles sont difficiles à mettre en oeuvre dans le cas de mélanges non-idéaux, l'estimation analytique des dérivées partielles (seule possible du fait de la dimension du vecteur d'itération) n'étant alors pratiquement pas possible.

En plus des caractéristiques que nous venons de décrire, pour toutes les méthodes du type THIELE-GEDES le choix du vecteur indépendant ne peut être effectué que parmi un ensemble réduit de configurations très voisines.

11-2. METHODES DE LEWIS ET MATHESON.

11-2.1. Algorithme de base.

L'algorithme de base proposé initialement par LEWIS et MATHESON {D19} , représenté sur la figure 11.2, est à itération directe. Si on suppose connue une première estimation des débits liquides ($l_j, j=1, jt$) et des concentrations y_d et x_b , son déroulement est le suivant :

1. Calcul plateau par plateau effectué généralement des extrêmités de la colonne vers le plateau d'alimentation, utilisant les équations de bilan matériel et d'équilibre. On obtient $v_j, x_j, y_j, j=1, jt, j \neq jf$ et deux estimations y_{if} et y_{jf} du vecteur des concentrations de la vapeur du plateau d'alimentation.
2. Test $y_{if} = y_{jf}$? non : cas 1 , continuer en 3, oui : cas 2 , aller en 5.
3. Correction des concentrations y_d et x_b de telle façon que $y_{if}=y_{jf}$ et que le bilan matériel de la colonne complété soient vérifiés.
4. Normalisation des concentrations y_d, x_b :
$$y_{d,i} = \frac{y_{d,i}}{\sum_{n=1}^m y_{d,n}} \quad i = 1, m$$
5. Résolution des équations de bilan enthalpique. On obtient $l_j, j=1, jt$
6. Test:cas 2 ? non : reprendre le calcul en 1,oui : continuer en 7.
7. Test : $l_j = l_j$ précédent, $j = 1, jt$? non : reprendre le calcul en 1, oui : fin

Remarque : de même qu'au paragraphe 11-1.1. le test 7 est généralement omis, la convergence sur les débits étant plus rapide que celle sur les concentrations.

Dans la procédure originale décrite ici, le calcul des concentrations et celui des débits (pas 1 et 5) sont disjoints. Deux autres modes de calcul, proposés par DAVIS et SOBEL {D9} , et par GREENSTADT, BARD et MORSE {D13} , permettent au contraire un calcul simultané, à chaque plateau, des débits et des concentrations.

11-2.2. Convergence.

La procédure décrite plus haut utilise le mode de convergence le plus simple. La méthode du "mismatch" développée par BONNER {D3} s'en rapproche beaucoup.

De même que précédemment, la méthode θ peut être utilisée {D15}, {D24}, et l'emploi de la méthode de NEWTON a été proposée par GREENSTADT, BARD et MORSE {D13}, le vecteur d'itération étant alors constitué de l'ensemble des concentrations y_d et x_b .

11-2.3. Caractéristiques de ces méthodes.

La méthode de LEWIS et MATHESON, dans sa version de base a la même généralité que celle de THIELE et GEDDES, mais ne permet pas l'emploi des méthodes matricielles. Quand elle est associée à la méthode θ ses performances ne sont pas supérieures à celles de son homologue utilisant la procédure de THIELE et GEDDES.

Par contre la méthode de LEWIS et MATHESON, dans les versions de DAVIS et col. ou de GREENSTADT et col., permet l'emploi d'une méthode générale de convergence dans laquelle la dimension du vecteur d'itération est sensiblement plus faible que dans les méthodes de BOYNTON ou de TOMICH, propriété que nous utiliserons dans la méthode proposée (paragraphe III-3). La méthode de GREENSTADT et col. présente cependant des difficultés de convergence lorsque la première estimation du vecteur d'itération est mauvaise, et paraît assez lente, sans doute parce que certaines méthodes numériques actuelles n'étaient pas disponibles quand elle a été proposée.

Remarquons, de plus, que dans ces différentes méthodes, la constitution du vecteur indépendant est définie de façon unique.

Les diverses caractéristiques décrites font que la méthode de LEWIS-MATHESON semble actuellement peu employée sauf peut-être pour le calcul de colonnes binaires.

11-3. METHODES DE RELAXATION.

Ces méthodes utilisent les équations représentant les régimes dynamiques de la colonne pour calculer un état final stable. La première fut proposée par ROSE et col. {D26} , et modifiée par BALL {D2} . Une forme simplifiée et très utilisée de ce type de méthode est celle dite des "flash successifs" {D14} , {D18} . Il est possible de montrer que, dans certaines conditions, elle donne une représentation approchée de l'évolution dynamique du procédé. Nous la décrivons à titre d'exemple.

11-3.1. Méthode des "flash successifs"

Si une première estimation des variables l_j, v_j, x_j est supposée connue pour les plateaux pairs, l'algorithme se déroule de la façon suivante :

1. Détermination, à l'aide des équations d'équilibre et d'enthalpie des variables y_j, hl_j, hv_j j pair.
2. Détermination des variables $x_j, y_j, l_j, v_j, hl_j, hv_j$ j impair, par des calculs d'état à enthalpie connue ("flash isenthalpiques").
3. Détermination, par la même méthode, de $x_j, y_j, l_j, v_j, hl_j, hv_j$ j pair.
4. Test : ces dernières valeurs sont-elles identiques à celles ayant servi de donnée au pas 2 ? non : reprendre le calcul en 2, oui : fin.

11-3.2. Caractéristiques des méthodes de relaxation.

Ces méthodes sont d'application très générale en ce qui concerne le type de colonne étudié et convergent de façon très sûre puisqu'elles représentent l'évolution dynamique d'un procédé stable. Par contre le nombre d'itérations nécessaires est en général important et le temps de calcul correspondant très long.

De plus le choix du vecteur indépendant est unique : celui-ci est constitué des variables d'entrée de la commande.

11-4. METHODES DE "RESOLUTION SIMULTANEE".

Ces méthodes sont caractérisées par un degré d'élaboration assez faible de la phase de réduction (voir paragraphe III-1.2.), ce qui entraîne une dimension importante du vecteur d'itération, et par l'emploi d'une méthode générale de convergence (voir paragraphe III-1.1.). Elles font partie de la classe d'algorithmes définis au paragraphe III-1.2. La plus représentative et la plus récente de ces méthodes est sans doute celle proposée par GOLDSTEIN et STANFIELD {D12} , qui est une généralisation et une amélioration de la méthode de NAPHTALI {D23} . Nous en donnons une description rapide ci-dessous.

11-4.1. Méthode de GOLDSTEIN et STANFIELD.

Dans cette méthode, le vecteur d'itération est constitué par l'ensemble des débits, des températures, et des concentrations en phase liquide, et la méthode de NEWTON est employée. Si on suppose connue une première estimation de ce vecteur, le déroulement de l'algorithme est le suivant :

1. Détermination du vecteur d'erreur
2. Test : ce vecteur est-il nul non : continuer en 3, oui : fin
3. Détermination analytique de la matrice des dérivées partielles
4. Inversion de cette matrice.
5. Calcul d'une nouvelle valeur du vecteur d'itération (méthode de NEWTON)
6. Reprendre le calcul en 1.

Le point délicat de cette méthode réside dans l'inversion de la matrice des dérivées partielles, dont la dimension est très importante. Les auteurs utilisent ses propriétés spécifiques pour réaliser cette inversion, et montrent que celle-ci reste possible quand la constitution du vecteur indépendant est modifiée.

11-4.2. Caractéristiques des méthodes de résolution simultanée.

Ces méthodes permettent de traiter de colonnes de structure quelconque, et de choisir librement la constitution du vecteur indépendant.

Elles nécessitent par contre un temps de calcul et un volume de mémoire très importants. La plus performante d'entre elles, celle de GOLDSTEIN et STANFIELD, ne permet pas, par exemple, de traiter une colonne de plus de 40 plateaux sur une machine IBM 360-65. Les auteurs proposent alors, pour le cas de colonnes plus importantes, une méthode traitant en bloc des groupes de plateaux, mais il en résulte une approximation et une plus grande complexité de la méthode.

11-5. CONCLUSIONS SUR LES METHODES EXISTANTES.

Il découle de la brève analyse qui précède qu'aucune des méthodes citées ne satisfait simultanément les quatre critères que nous avons définis en introduction. En effet la méthode de GOLSTEIN et STANFIELD, qui s'en rapproche le plus du point de vue des propriétés intrinsèques, présente des difficultés de mise en oeuvre pratique, et celle de HOLLAND qui représente au contraire le meilleur compromis du point de vue de la simplicité et la rapidité ne possède pas la souplesse désirée. Ces deux méthodes nous serviront cependant de point de comparaison pour étudier les performances de la méthode proposée (paragraphe IV-8).

Remarquons que la méthode de GREENSTADT, BARD et MORSE, bien que ne satisfaisant pas les critères énoncés, représente une formulation intéressante. Elle permet en effet l'emploi d'une méthode générale de convergence avec un vecteur d'itération de dimension restreinte. Nous verrons qu'elle peut être considérée comme un cas particulier de la méthode proposée.

Algorithme de calcul de THIELE et GEDDES

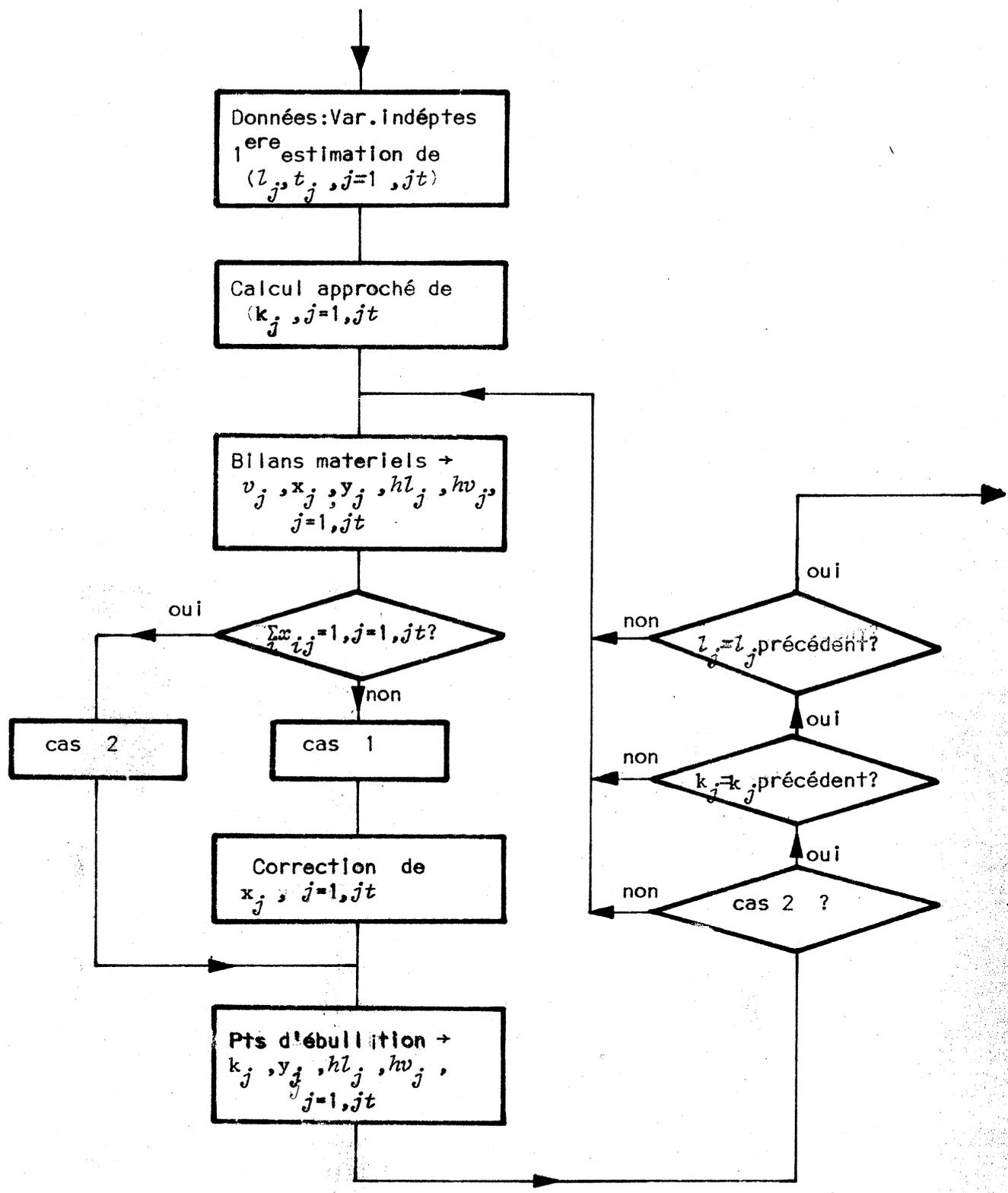


Figure 11-1

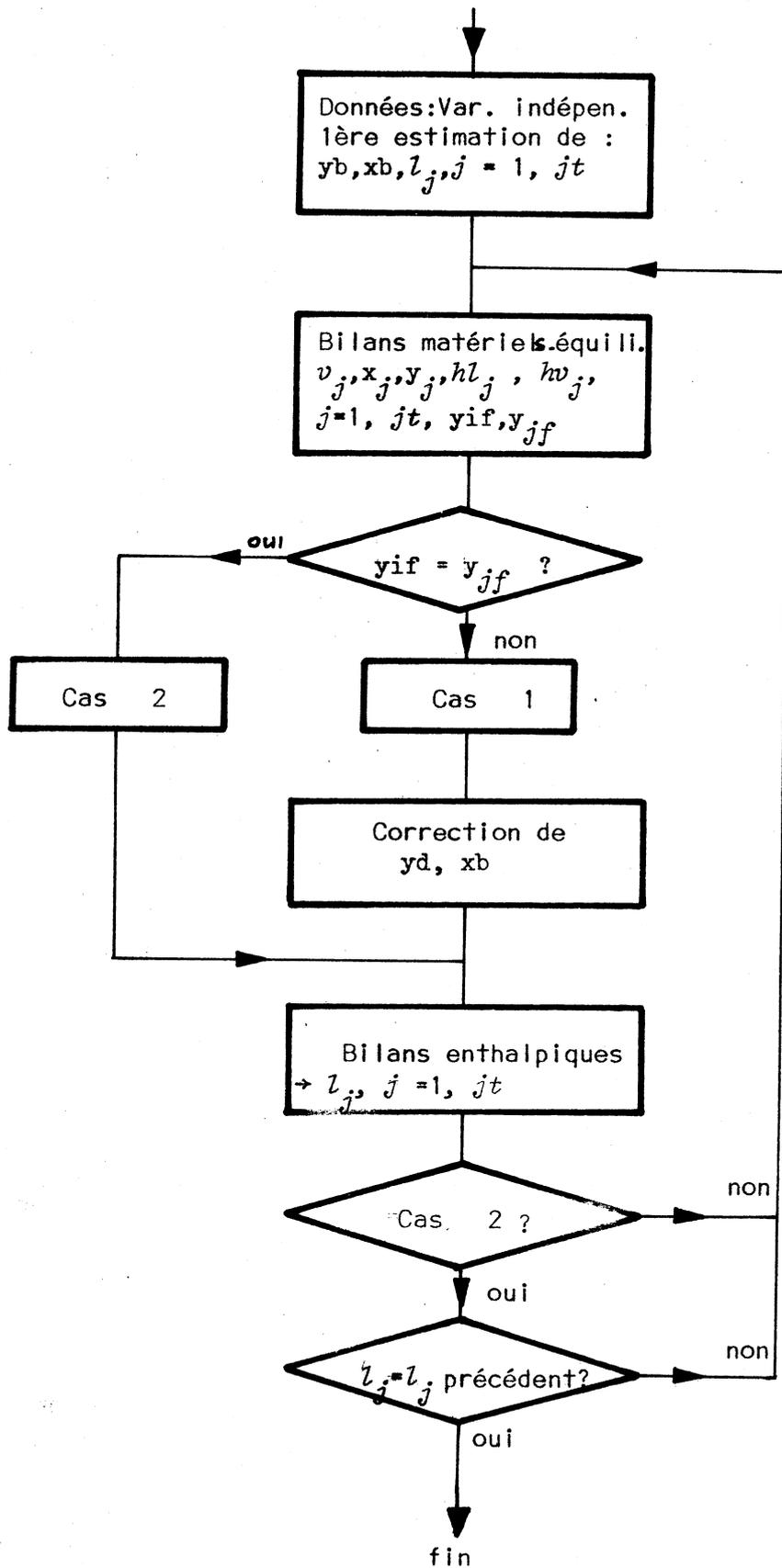


Figure 11.2

Algorithme de la méthode des flash successifs.

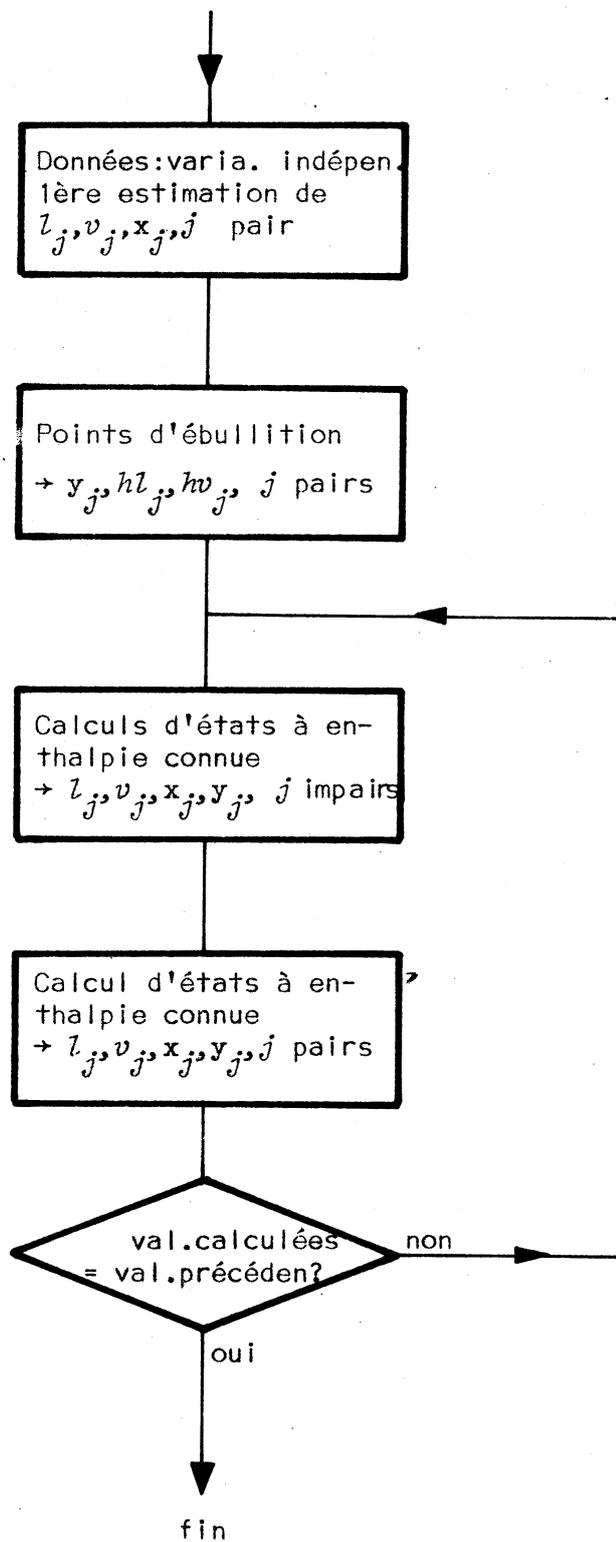
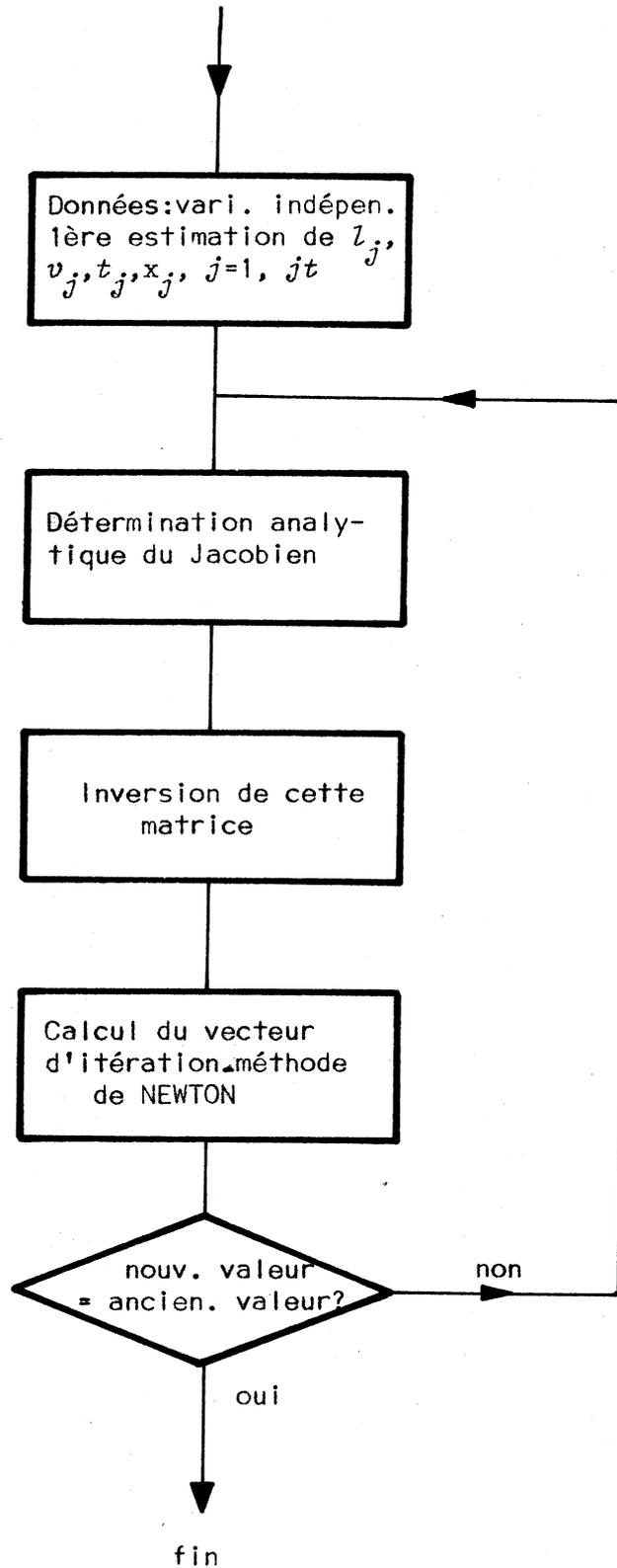


Figure 11.3

Algorithme de calcul de GOLDSTEIN et STANFIELDFigure 11.4

CHAPITRE III

METHODE PROPOSEE

PHASE DE REDUCTION

Nous avons pu mettre en évidence, dans l'introduction, quatre critères auxquels doit satisfaire une méthode de résolution pour que son emploi pratique généralisé soit possible, et nous avons montré, dans la partie précédente qu'une telle méthode n'existait pas actuellement.

Dans ce qui suit une analyse du problème nous permet tout d'abord de déterminer la structure adéquate de l'algorithme de calcul cherché, puis nous décrivons sa mise en oeuvre pratique.

La formulation du problème employée nous a permis d'élaborer une structure de calcul nouvelle, qui détermine pour une grande part les propriétés de la méthode proposée, et qui en constitue l'originalité fondamentale, les algorithmes employés à chaque pas du calcul étant déjà, pour la plupart, utilisés dans d'autres méthodes connues.

Nous nous sommes cependant attachés à développer une mise en oeuvre performante de l'algorithme proposé. Les points suivants, en particulier, nous paraissent importants:

- Nous avons effectué une étude poussée des propriétés de convergence des algorithmes classiques employés à chaque pas du calcul, étude qui avait été jusqu'à présent rudimentaire ou inexistante dans la plupart des cas, le but étant d'évaluer le degré de fiabilité de la méthode proposée.

- Nous employons, pour la convergence globale, une méthode plus puissante (voir chapitre IV) que celles qui avaient jusqu'à présent été appliquées dans les calculs de distillation, et nous en étudions les conditions d'application.

Le chapitre III est consacré plus particulièrement à la description de la structure d'ensemble et de l'algorithme de réduction, le chapitre IV à la description de la méthode de convergence employée, et à sa mise en oeuvre pratique.

III-1. DETERMINATION DE LA STRUCTURE DE L'ALGORITHME DE CALCUL.

III-1.1. Remarques générales.

La propriété essentielle recherchée est la possibilité d'un choix arbitraire de la constitution du vecteur indépendant. Ceci entraîne qu'il est pratiquement nécessaire d'employer une méthode générale de convergence. (Nous entendons par méthode générale de convergence une méthode applicable à un système quelconque d'équations). En effet, le nombre de configurations du vecteur indépendant pouvant être très grand, on ne peut pas envisager d'élaborer une méthode particulière pour chacune d'elles, et de plus, dans un grand nombre de cas une telle méthode n'existe pas.

Cette hypothèse de travail se trouve d'ailleurs confirmée par l'étude des méthodes existantes : celles présentant la souplesse désirée, sont les méthodes de résolution simultanée, qui utilisent précisément une méthode générale de convergence.

Nous avons vu cependant que celles-ci ne sont pratiquement pas applicables sous leur forme actuelle, principalement à cause de la dimension trop importante du vecteur d'itération, qui entraîne des calculs longs et encombrants.

La définition du vecteur d'itération est en effet une étape importante de l'élaboration de la méthode.

Deux voies peuvent être envisagées pour réduire et si possible minimiser le temps de calcul :

1. Rechercher, parmi les vecteurs d'itération possibles de dimension raisonnable, celui qui, du fait des propriétés particulières du système conduit à un temps de calcul réduit. Un exemple de ce type est le cas où les dérivées partielles nécessaires à la mise en oeuvre de la méthode de convergence pourraient être calculées analytiquement. Mais étant donnée la complexité du système d'équations et la diversité des vecteurs indépendants possibles, nous n'avons pas rencontré de solution dans cette voie.

2. L'autre solution consiste à rechercher la mise en forme du problème rendant minimale la dimension du vecteur d'itération, sachant que ceci est un facteur de réduction du temps de calcul et de l'encombrement.

Le problème de l'évaluation des dérivées partielles est alors résolu en second lieu.

C'est dans cette seconde voie que nous nous sommes engagés. Remarquons que l'algorithme proposé par GUENSTADT, BARD et MORSE constitue un pas important dans ce sens. Nous nous en inspirons, mais nous allons plus loin et de plus la formulation proposée permet d'atteindre la souplesse désirée, ce qui n'est pas le cas de la méthode citée ci-dessus.

III-1.2. Algorithme général employé.

Nous décrivons ici la structure générale de l'algorithme de résolution employé. Cette formulation nous permettra, dans le paragraphe suivant d'étudier la structure fine de l'algorithme.

L'algorithme décrit permet de résoudre un système d'équations quelconques de grande dimension à l'aide d'une méthode générale de convergence. Son domaine d'application est très étendu.

Soit le système d'équations quelconques, de dimension n_x , défini par :

$$(III-1) \quad \begin{aligned} \psi_1(x_1, x_2, \dots, x_{n_x}) &= 0 \\ \vdots \\ \psi_{n_x}(x_1, x_2, \dots, x_{n_x}) &= 0 \end{aligned}$$

qu'on peut écrire de façon condensée :

$$\psi(x) = 0$$

Supposons qu'il existe un vecteur u , de dimension n_u , formé d'éléments de x , tel que, u étant connu et situé dans un domaine \bar{U} comprenant la solution de (III-1), on puisse résoudre de façon simple et rapide le système (III-1). (u est le vecteur d'itération de l'algorithme itératif que nous décrivons plus loin. La résolution de (III-1), u étant connu, fournit alors, en plus de la valeur des $(n_x - n_u)$ éléments inconnus de x , celle de n_u variables d'erreur constituant le vecteur d'erreur w . Ce dernier doit alors être choisi de façon à être nul lorsque u est une partie de la solution du système (III-1).

L'opération précédente que nous appellerons la phase de réduction, fait correspondre à toute valeur de u compris dans U une valeur w , et définit ainsi l'application ϕ de R^{nu} dans R^{nu} :

$$(III-2) \quad w = \phi(u)$$

et le problème posé consiste à résoudre le nouveau système

$$(III-3) \quad \phi(u) = 0$$

Nous appelons phase de convergence l'opération consistant à déterminer une suite de valeurs de u convergent vers la solution (résolution du nouveau système III-3).

L'algorithme de résolution, représenté sur la figure III-1, consiste en l'exécution alternée de calculs de réduction et de convergence jusqu'à ce que le vecteur d'erreur w soit aussi proche de zéro qu'on le désire.

On voit aisément qu'à l'aide de cette procédure, le problème initial, qui est celui de la résolution du système (III-1) de dimension nx importante est remplacé par celui de la résolution du système (III-3) de dimension nu plus faible.

Remarquons qu'il est toujours possible de définir un couple de vecteurs u, w , le cas trivial étant celui où u est identique à x et w à $\psi(u)$, aucune réduction n'étant alors obtenue. L'utilisation des propriétés particulières du système conduit cependant à une réduction dans beaucoup de cas, et nous verrons en particulier que, dans le cas d'un modèle de colonne de distillation, cette méthode est très efficace, le vecteur d'itération résultant étant de très faible dimension.

III-1.3. Etude de la structure de l'algorithme de réduction.

L'étude des relations existant entre la constitution des vecteurs indépendant, d'itération et d'erreur et la structure de l'algorithme de réduction vont nous permettre de choisir cette dernière en fonction des objectifs fixés.

III-1.3.a. Vecteur indépendant, vecteur d'itération, vecteur d'erreur.

Soient a le vecteur indépendant, de dimension na et s le vecteur d'entrée du calcul de réduction (ou l'un des vecteurs d'entrée) de dimension ns du calcul de réduction, c'est-à-dire l'ensemble des variables qu'il est nécessaire de connaître pour pouvoir effectuer ce calcul.

Les éléments de s , supposés connus, font nécessairement partie du vecteur indépendant a ou du vecteur d'itération u . D'où :

$$(III-4) \quad s \subset [a \cup u]$$

De plus le vecteur d'itération u ne peut pas comporter d'éléments calculés au cours de la réduction ; il est donc obligatoirement compris dans le vecteur s d'où

$$(III-5) \quad u \subset s$$

Enfin le vecteur u ne peut contenir d'éléments faisant partie également du vecteur indépendant a . Il n'a donc pas de partie commune avec a soit

$$(III-6) \quad u \cap a = 0$$

Les vecteurs a et s étant connus, les trois relations précédentes suffisent pour déterminer complètement la constitution de u : le vecteur d'itération u est formé de la partie des extérieures à a . Ceci est schématisé sur la figure III.2.

Soit as (de dimension nas) la partie commune de a et de s , ae (de dimension nae) la partie de a extérieure à s .

On a :

$$(III-7) \quad as = a \cap s$$

$$(III-8) \quad ae \cup as = a$$

$$(III-9) \quad ae \cap as = 0$$

En combinant les relations (III-4) à (III-7) on obtient

$$(III-10) \quad u \cap as = 0$$

$$(III-11) \quad u \cup as = s$$

De ces deux dernières équations on peut tirer la dimension de u :

$$(III-12) \quad nu = ns - nas$$

ou encore

$$(III-13) \quad nu = ns - na + nae$$

Cette dernière relation permet de voir que la dimension minimale num de u est obtenue quand nae est nul, c'est-à-dire quand a est compris dans s . Ceci est possible car en effet la dimension de s est toujours au moins égale à celle de a . $a \in s$ entraîne :

$$(III-14) \quad num = ns - na$$

Plaçons-nous dans ce cas, que nous appellerons par la suite une réalisation minimale de l'algorithme de réduction. Toutes les variables indépendantes, qui font partie dans ce cas du vecteur d'entrée de l'algorithme de réduction, prennent dès le départ la valeur désirée. Le vecteur um contient seulement les variables supplémentaires nécessaires à la réalisation de cet algorithme. Le vecteur d'erreur w_m est de dimension $num = num$, puisque le fait de fixer la valeur de num variables supplémentaires laisse subsister num équations libres permettant chacune de définir une variable d'erreur.

Si maintenant a n'est pas totalement compris dans s , nae est alors différent de zéro et la dimension de u est donnée par la relation :

$$(III-15) \quad nu = num + nae$$

Les éléments du vecteur ae , qui sont des variables indépendantes, apparaissent alors comme résultats de calcul dans la réduction. Ceci fait ainsi apparaître dans le vecteur d'erreur w , en plus de la partie w_m précédente, ne nouvelles composantes définies comme différence entre la valeur calculée et la valeur désirée des éléments de ae :

$$(III-16) \quad w_{(num+i)} = ae_i \text{ calculé} - ae_i \text{ désiré}$$

Le vecteur d'erreur w est ainsi composé de deux parties jouant un rôle différent :

- La partie fondamentale w_m existe dans tous les cas, et ne dépend pour sa constitution que de l'algorithme de réduction. La relation $w_m = 0$ assure que le système d'équations est vérifié intégralement, mais éventuellement pour des valeurs incorrectes des variables indépendantes.

- La partie secondaire w_e , constituée des éléments $w_{e_i} = w_{(num+i)}$ définis précédemment, dépend au contraire à la fois de l'algorithme de réduction et de la constitution du vecteur indépendant a . La relation $w_e = 0$ assure que toutes les variables indépendantes ont bien la valeur désirée. Remarquons que dans le cas d'une réalisation minimale la partie secondaire w_e est inexistante.

III-1.3.b. Cas d'un algorithme fixe de réduction.

L'objectif poursuivi pour le choix de l'algorithme de réduction, est l'obtention d'un vecteur u de dimension minimale. Cette dimension variant avec la constitution du vecteur indépendant a , on s'attachera à minimiser la dimension de u en priorité pour les vecteurs a apparaissant le plus fréquemment. D'où les deux conditions suivantes :

- La dimension num correspondant à une réalisation minimale doit être aussi faible que possible.

- Pour les configurations courantes du vecteur indépendant, la dimension du vecteur d'itération doit être aussi proche que possible de celle correspondant à une réalisation minimale.

Une réalisation minimale est obtenue quand $a \in s$, ce qui définit une classe A de vecteurs indépendants a . Dans le cas d'un algorithme fixe, l'entrée s est unique, et le nombre de vecteurs a faisant partie de la classe A peut être très restreint. La souplesse est dans ce cas obtenue au prix d'une augmentation fréquente de la dimension du vecteur d'itération. (Figure III.3)

III-1.3.c. Cas d'un algorithme de réduction à chemins multiples.

Supposons maintenant que l'algorithme de réduction comporte nc chemins possibles correspondant aux vecteurs d'entrée s_i , $i=1, nc$. Pour l'entrée i , on peut définir la dimension nu_i du vecteur d'itération u_i correspondant. D'après (III-15) on a :

$$(III-17) \quad nu_i = num + nae_i$$

Il est clair, d'après cette relation, que, dans ce cas, l'entrée choisie est l'entrée ic qui rend minimale la quantité nu_i .

$$(III-18) \quad nu_{ic} = \underset{i}{\text{Min}} (nu_i)$$

ou encore

$$(III-19) \quad nae_{ic} = \underset{i}{\text{Min}} (nae_i)$$

Si A_i est la classe des vecteurs a conduisant à leur réalisation minimale pour l'entrée i , la classe A globale des vecteurs qui conduisent à une réalisation minimale pour au moins une entrée i est alors définie comme étant la réunion des classes A_i , pour $i=1, ic$.

$$(III-20) \quad A = A_1 \cup A_2 \cup \dots \cup A_{ic}$$

Si on dispose de vecteurs d'entrée bien choisis, on peut ainsi augmenter considérablement le nombre de combinaisons de variables indépendantes auxquelles correspondent un vecteur d'itération de dimension minimale.

Dans le cas où a reste malgré tout extérieur à la classe A , le résultat est également positif. En effet, si if est l'indice correspondant à l'entrée unique du cas de l'algorithme fixe considéré précédemment, la relation (III-18) entraîne

$$(III-21) \quad nu_{ic} \leq nu_{if}$$

C'est-à-dire que la dimension du vecteur d'itération est en général diminuée par l'emploi d'un algorithme à chemins multiples.

III-1.3.d. Structure retenue. Critères d'élaboration pratique de l'algorithme de réduction.

Le résultat précédent conduisait à proposer un algorithme comportant un chemin pour chaque vecteur possible de variables indépendantes, solution qui n'est pas envisageable pour les raisons suivantes :

- Le système d'équations n'est pas soluble de façon simple et rapide en fonction de tout vecteur d'entrée.

- Le volume du programme résultant croît proportionnellement au nombre et à la longueur des chemins.

Ces considérations nous ont conduits à adopter une solution mixte en ce qui concerne la structure de l'algorithme : L'algorithme de réduction proposé, dont le schéma est donné figure III.4, comporte une partie finale commune, constituant la partie principale du calcul, et dont le vecteur d'entrée sf est (nécessairement) unique. L'entrée de l'algorithme comporte plusieurs chemins possibles, et ne fait intervenir qu'un nombre restreint de variables. Les vecteurs d'entrée s_i sont nécessairement de dimension identique, propriété qui a été utilisée implicitement dans tout le paragraphe III-1.3.c.. Chaque chemin d'entrée fournit comme résultat le vecteur sf d'entrée de la partie commune.

Si on rappelle les conditions énoncées au début du paragraphe III-1.3.b. et ci-dessus en fonction de la structure définie précédemment, on obtient les critères d'élaboration suivants pour la phase de réduction.

- La partie commune de l'algorithme doit être choisie de façon à minimiser la quantité *num* (dimension du vecteur d'itération dans le cas d'une configuration minimale).

- La différence entre les temps de calcul correspondant à deux entrées distinctes doit être faible vis à vis du temps de calcul total de la phase de réduction.

- La multiplicité des entrées ne doit pas être telle que le volume du programme résultant soit trop augmenté. On se limitera ainsi aux entrées correspondant à des configurations relativement courantes du vecteur indépendant.

On remarquera que la structure même de l'algorithme de réduction implique que certaines variables, en particulier celles dont la valeur est calculée dans la partie commune, ne peuvent pas faire partie du vecteur d'entrée de cet algorithme.

III-2. ALGORITHME DE REDUCTION. CALCUL DES EQUILIBRES LIQUIDE-VAPEUR.

Au cours du calcul de réduction, des déterminations d'équilibres liquide-vapeur apparaissent un grand nombre de fois sous trois formes seulement : calcul du point d'ébullition, du point de condensation, calcul de l'état d'un mélange.

Afin de simplifier l'exposé, nous décrivons à part, dans ce chapitre, les algorithmes de calcul correspondants.

Nous avons inclus le calcul des enthalpies dans les mêmes algorithmes car en effet il faut intervenir les mêmes déterminations d'états thermodynamiques que les équilibres, et il en résulte ainsi un gain de temps de calcul.

Dans ce chapitre, nous décrivons les algorithmes couramment employés tels qu'ils peuvent être mis en oeuvre dans la méthode de DAVIS et SOBEL par exemple (voir paragraphe III-3.1.). Pour l'emploi de la méthode de NEWTON, on peut se reporter directement au chapitre III-3.2.

Dans cette description, nous tentons de mettre plus particulièrement en évidence les propriétés d'existence et d'unicité de la solution dans son domaine de variations admissibles, et celles de sécurité de la convergence de ces algorithmes dont la structure est classique

III-2.1. Point d'ébullition et point de condensation d'un mélange.

III-2.1.a. Calcul du point d'ébullition d'un mélange en phase liquide.

Dans les conditions du plateau j , les variables indépendantes de ce calcul sont la pression p , le vecteur des concentrations en phase liquide x_j . Les variables calculées sont la température d'équilibre t_j , le vecteur des concentrations \bar{y}_j de la phase vapeur en équilibre avec la phase liquide, le vecteur des coefficients d'équilibre, l'enthalpie des deux phases h_j^l , \bar{h}_j^v .

Les équations utilisées pour ce calcul sont les équations (I-33), (I-37), (I-35), (I-38), (I-39), appliquées au plateau j . La résolution itérative de ce système est effectuée selon l'algorithme de la figure III-5.a.

Une boucle d'itération interne, utilisant la méthode de MULLER (voir plus loin) appliquée séparément à chaque élément de k_j quand la matrice $\frac{\partial k}{\partial y}$ est diagonale (ce qui est le cas le plus fréquent), ou, dans le cas contraire, une méthode d'itération directe ou la méthode de NEWTON, permet d'obtenir les vecteurs k_j et y_j satisfaisant les équations (I-33) et (I-34) pour une température t_j donnée. La boucle d'itération externe détermine la valeur de t_j satisfaisant l'équation (I-35). La convergence de cette boucle est assurée par la méthode de MULLER {M13}, (voir annexe 1), qui utilise un procédé d'interpolation parabolique. Une fois la convergence atteinte les enthalpies sont calculées à l'aide des équations (I-38) et

(I-39).

Pour démartrer le calcul, il est nécessaire de fournir une première estimation de la température t_j . La première estimation des coefficients d'équilibre peut en général être obtenue par un calcul approché (en supposant par exemple les coefficients d'activité de la phase Inconnue égaux à 1).

III-2.1.b. Calcul du point de condensation d'un mélange en phase vapeur.

Ce problème est le symétrique du précédent. Pour le plateau j , les variables indépendantes sont la pression p , le vecteur des concentrations de la phase vapeur y_j , et les variables calculées sont la température t_j , les vecteurs \bar{x}_j , k_j , les enthalpies h_{vj} , $\bar{h}l_j$.

Les équations utilisées sont les équations (I-30), (I-31), (I-32), (I-36), (I-37). L'algorithme de calcul est donné figure III.5.b. Il est analogue au précédent, et possède les mêmes propriétés.

III-2.1.c. Existence et unicité de la solution. Sécurité de la convergence.

Plaçons-nous, pour étudier ces propriétés, dans le cas du calcul de point d'ébullition. Une même étude conduirait à des résultats identiques dans le cas du calcul de point de condensation, analogue en tout point au précédent.

Examinons tout d'abord la boucle d'itération interne, dont la fonction est de fournir la valeur de vecteur k telle que l'équation suivante soit vérifiée

$$(III-22) \quad k = \mu(p, t, x, Kx)$$

où K est la matrice diagonale dont les éléments non nuls sont ceux de k , et où les indices de k , x , t ont été omis, ces variables se rapportant toutes au plateau j .

Ce problème doit être résolu pour différentes valeurs successives de t dans un certain voisinage de la température d'équilibre t^* correspondant à x et p . Lorsque le calcul est effectué pour cette dernière, la fonction μ est un modèle thermodynamique du mélange. La pression étant

toujours supposée inférieure à la pression critique du mélange (condition fondamentale pour que la distillation puisse avoir lieu) on sait que les conditions de l'équilibre existent et sont uniques. Ceci entraîne, si on suppose que le modèle thermodynamique est suffisamment proche de la réalité, que le système (III-22) a nécessairement une solution acceptable (c'est-à-dire pour laquelle les coefficients d'équilibre sont positifs ce qui entraîne, d'après (I-30) et (I-32) que toutes les concentrations calculées sont comprises entre 0 et 1).

Remarquons que le système (III-22) peut avoir éventuellement d'autres solutions que celle correspondant à l'équilibre réel. En fait un modèle ne peut être considéré comme satisfaisant que s'il fournit une solution unique dans le domaine des variations acceptables. En effet, dans le cas contraire il serait impossible de choisir entre plusieurs solutions faisant partie de ce domaine.

Si nous supposons que le modèle employé satisfait cette condition, on en déduit que même si plusieurs solutions (III-22) existent, on en rencontre une et une seule dans le domaine où tous les coefficients d'équilibres sont positifs. Pour s'assurer qu'au cours de l'itération le vecteur k reste bien dans ce domaine, on peut effectuer la transformation suivante de k en k^* .

$$k_i^* = \text{Log} k_i, \quad i=1, m$$

qui au domaine de variation $[-\infty +\infty]$ de k_i^* fait correspondre le domaine $]0 +\infty]$ de k_i . Le système (III-22) devient alors :

$$(III-23) \quad k_i = \text{Log} \left[\mu_i(p, t, x, \exp.(k^*).x) \right] \quad i=1, m$$

La solution de ce système existe nécessairement et est unique, et on est de plus assuré qu'elle correspond effectivement à l'état physique réel.

Cette boucle interne est aussi exécutée pour des valeurs de la température ne correspondant pas à l'équilibre (voir l'algorithme de la figure III.5.a.), pour lesquelles la fonction μ_i , qui n'a en général plus de signification physique, peut théoriquement avoir des propriétés arbitraires. Cependant, les fonctions généralement employées sont continues vis à vis de toutes les variables dans leur domaine de définition. On en déduit qu'il existe ainsi un domaine fini de température au voisinage de la température d'équilibre t^* où, par continuité, les propriétés

d'existence et d'unicité de la solution de (III-23) sont conservées.

Remarquons que dans le cas de l'équilibre idéal, où k ne dépend pas des concentrations $\frac{\partial \mu}{\partial x} = 0$, $\frac{\partial \mu}{\partial y} = 0$, la fonction μ a une signification physique pour toute température comprise dans le domaine de validité du modèle thermodynamique. La solution de (III-23) existe alors et est unique dans tout ce domaine. Dans le cas général, la dépendance de k des concentrations constitue seulement une correction par rapport au cas de l'équilibre idéal. On peut ainsi prévoir que le domaine de température dans lequel l'existence et l'unicité de la solution sont confirmées est en général assez étendu pour permettre l'exécution de l'algorithme décrit au paragraphe III-2.1.a.

Le première estimation de la température étant en principe la plus éloignée de la température d'équilibre c'est sur elle que repose la fiabilité du calcul. Le choix, pour cette estimation, de la température du plateau voisin, déjà calculée, ou d'une extrapolation des températures de plusieurs plateaux voisins a toujours conduit, dans les applications traitées à un déroulement correct du calcul.

En plus du problème de la première estimation de t , se pose celui de la première estimation de k . En effet la fonction μ est évaluée, au cours de la procédure itérative, pour des valeurs de k différentes de la valeur correspondant à l'équilibre. Il faut seulement dans ce cas que la fonction μ soit calculable. Selon le type de modèle employé, ceci peut parfois poser un problème. Il semble cependant que la première estimation de k obtenue à partir de t , en supposant les coefficients d'activité égaux à 1 donne généralement satisfaction.

Remarquons de plus que, quand la matrice des dérivées partielles $\frac{\partial \mu}{\partial y}$ est diagonale, ce qui correspond à la majorité des cas, les propriétés d'existence et d'unicité de la solution que nous venons de mettre en évidence sont suffisantes pour garantir la convergence de la méthode de MULLER. Il est de même possible, en utilisant les propriétés thermodynamiques des mélanges, de montrer que le théorème du point fixe est satisfait et que l'itération directe converge dans ce cas.

Par contre quand la matrice $\frac{\partial \mu}{\partial y}$ n'est pas diagonale, il n'est pas possible de démontrer que l'algorithme d'itération directe ou celui de NEWTON converge. On se borne à remarquer que ce cas est peu fréquent, que les éléments diagonaux restent généralement largement prépondérants,

et que pratiquement la convergence a de fortes chances d'être obtenue . Remarquons que dans le cas d'un problème très difficile on pourrait envisager l'emploi de la méthode de DAVIDENKO (voir chapitre IV), dans laquelle il suffit d'augmenter le nombre d'étapes pour assurer la convergence.

En réalité de tels problèmes ne se sont jamais présentés dans les applications effectuées et la méthode de MULLER a toujours donné satisfaction.

Dans la boucle extérieure la somme des concentrations en phase vapeur est une fonction ϕ de la température uniquement et celle-ci doit être telle que :

$$\phi(t) = \sum_i y_i = \sum_i k_i x_i = 1$$

Nous avons vu que si la température t est celle d'équilibre, toutes les autres variables correspondent aussi à l'équilibre. On peut ainsi affirmer que si le modèle physique est correct il existe au moins une température telle que $\phi(t) = 1$.

On sait physiquement qu'à pression et concentrations liquides constantes les coefficients d'équilibre sont des fonctions uniformément croissantes de la température, dans les conditions usuelles. La fonction $\phi(t)$ est donc elle-même uniformément croissante, et la solution est donc unique.

De plus, cette propriété garantit la convergence par la méthode de MULLER, ce qui est confirmé par l'expérience.

III-2.2. Etat d'un mélange comportant une phase liquide et une phase vapeur en équilibre.

Dans les conditions de l'alimentation, les variables indépendantes du calcul sont le débit global f et le vecteur des concentrations globales z^f ainsi que l'une des deux variables t^f (température) ou h^f (enthalpie globale). Les variables calculées sont les débits f^l et f^v , les vecteurs des concentrations x^f et y^f , les enthalpies $h^l f$, $h^v f$ des deux phases, ainsi que h^f ou t^f . Nous envisageons successivement ces deux cas, le second utilisant l'algorithme du premier comme algorithme de réduction.

III-2.2.a. Calcul d'état à température connue.

Ce calcul, appelé aussi "flash isotherme", met en jeu les équations (I-57), (I-61), (I-63), (I-64). L'algorithme utilisé est donné sur la figure III.6.a.

Une boucle d'itération interne agit sur les vecteurs k^f , x^f , y^f de façon à satisfaire les équations (I-58), (I-59), pour des débits liquide et vapeur donnés. Cette boucle joue un rôle analogue à la boucle interne des algorithmes précédents, et utilise les mêmes méthodes de convergence.

La boucle externe utilise les équations (I-57), (I-61) pour déterminer le débit vapeur et le débit liquide. La convergence de cette boucle est assurée par la méthode de MULLER.

Après convergence des deux boucles d'itération les enthalpies liquide et vapeur h^l_f et h^v_f sont calculées à l'aide des équations (I-63), (I-64).

En son début, l'algorithme comporte un test visant à repérer les cas triviaux où le système ne comporte qu'une seule phase. Les cas limites sont ceux où il existe un liquide seul à température d'ébullition, ou une vapeur seule à température de condensation. Un calcul de point d'ébullition effectué sur le liquide de concentration z^f et un calcul de point de condensation effectué sur la vapeur de concentration z^f , toutes deux à la pression p fournissent les données relatives à ces points extrêmes :

point d'ébullition : t^f_{eb} , h^l_{eb} , k^f_{eb} ($f_v = 0$)

point de condensation : t^f_{cond} , h^v_{cond} , k^f_{cond} ($f_v = f$)

Trois cas peuvent alors se présenter selon la valeur relative de t^f , t^f_{eb} et t^f_{cond} .

1. $t^f \leq t^f_{eb}$: Le liquide seul existe, l'état est alors défini par les équations (I-49) à (I-52) et (I-63)
2. $t^f \geq t^f_{cond}$: La vapeur seule existe, l'état est défini par les équations (I-53) à (I-56) et (I-64)
3. $t^f_{eb} < t^f < t^f_{cond}$: Le système comporte les deux phases, et son état est calculé à l'aide de l'algorithme décrit plus haut.

Dans le troisième cas, ces calculs permettent d'obtenir, par interpolation, les premières estimations de f_v et de k_f qui sont nécessaires au démarrage de la procédure :

$$f_v = f \cdot (t_f - t_{f_{eb}}) / (t_{f_{cond}} - t_{f_{eb}})$$

$$k_f = k_{f_{eb}} + (k_{f_{cond}} - k_{f_{eb}}) \cdot (t_f - t_{f_{eb}}) / (t_{f_{cond}} - t_{f_{eb}})$$

III-2.2.b. Calcul d'état à enthalpie connue.

Ce calcul, aussi appelé "flash isenthalpique", met en jeu l'algorithme de calcul d'état à température connue (équations (I-57) à (I-61), (I-63), (I-64) et de plus l'équation (I-62). L'algorithme utilisé est donné sur la figure III.6.b.

Il comporte une boucle d'itération sur la température. Celle-ci doit être telle que l'équation (I-62) soit satisfaite. La convergence de cette boucle est assurée par la méthode de MULLER.

Comme dans le cas précédent, les calculs de points d'ébullition et de condensation correspondant aux cas limites étant effectués on se trouve dans un des trois cas possibles, selon la valeur relative de h_f , $h_{lf_{eb}}$, $h_{vf_{cond}}$:

1. $h_f \leq h_{lf_{eb}}$: Le liquide seul existe, et l'état est défini par les équations (I-49) à (I-52)
2. $h_f \geq h_{vf_{cond}}$: La vapeur seule existe, et l'état est défini par les équations (I-53) à (I-56)
3. $h_{lf_{eb}} < h_f < h_{vf_{cond}}$: Le système comporte les deux phases et son état est calculé à l'aide de l'algorithme décrit plus haut.

Dans le troisième cas, le test situé au début de l'algorithme à température connue peut être supprimé, car en effet il est équivalent à celui décrit ici. Des valeurs calculées pour les points extrêmes on peut tirer par interpolation les premières estimations de t_f , f_v et k_f nécessaires au démarrage du calcul :

$$tf = tf_{eb} + (tf_{cond} - tf_{eb}) \cdot (hf - hlf_{eb}) / (hwf_{cond} - hlf_{eb})$$

$$fv = f \cdot (tf - tf_{eb}) / (tf_{cond} - tf_{eb})$$

$$kf = kf_{eb} + (kf_{cond} - kf_{eb}) \cdot (tf - tf_{eb}) / (tf_{cond} - tf_{eb})$$

III-2.2.c. Existence et unicité de la solution. Sécurité de la convergence.

Etudions successivement chaque boucle d'itération en commençant par la boucle intérieure du premier algorithme.

Pour la boucle interne, qui modifie kf , xf , yf , le problème de l'existence et l'unicité de la solution se pose dans les mêmes termes que pour le point d'ébullition : si pour la température tf donnée, le débit fv est correct, la fonction μ a un sens physique ; La solution existe alors et est unique si on a fait la même transformation de k que précédemment. Par continuité cette propriété est valable pour un domaine fini de variations de fv autour de la valeur d'équilibre, domaine qu'on peut prévoir suffisamment large pour permettre le calcul selon l'algorithme du paragraphe III-2.2.a.

La convergence de la méthode de MULLER, qu'on peut employer dans la majorité des cas (matrices $\frac{\partial \mu}{\partial x}$ et $\frac{\partial \mu}{\partial y}$ diagonales) est garantie par ces propriétés, et celle des algorithmes d'itération directe et de NEWTON n'est que probable dans les autres cas (voir paragraphe III-2.1.c.)

Pour la boucle externe du premier algorithme, le test effectué au début sépare les cas où tf est à l'extérieur de l'intervalle $]tf_{eb}, tf_{cond}[$, pour lesquels le calcul est direct.

Envisageons maintenant le cas où :

$$tf_{eb} < tf < tf_{cond}$$

Soit $\phi(fv)$ la fonction d'erreur de cette boucle, définie par la relation

$$\phi(fv) = \sum_{i=1}^m yf_i - \sum_{i=1}^m xf_i$$

Examinons sa valeur pour les conditions extrêmes où $fv=0$ et $fv=1$. Dans le premier cas, xf est égal à zf , d'où :

$$\sum_{i=1}^m zf_i = 1$$

La température tf est alors supérieure à la température d'équilibre tf_{eb} correspondant à xf (III-23). On sait physiquement que, si l'un des vecteurs de concentration liquide ou vapeur est fixé, les coefficients d'équilibre sont une fonction croissante de la température d'où

$$\sum_{i=1}^m yf_i > 1$$

ce qui entraîne :

$$\phi(0) > 0$$

On démontrerait de la même façon que :

$$\phi(f) < 0$$

Les fonctions intervenant dans ces calculs étant continues, la fonction ϕ est continue, et il est certain qu'il existe au moins une valeur de fv comprise entre 0 et f pour laquelle la valeur de ϕ est nulle.

Nous pourrions effectuer un raisonnement analogue à celui du paragraphe III-2.1.c pour montrer l'unicité de la solution. Nous emploierons plutôt une expression approchée de la dérivée $\frac{d\phi}{dfv}$ pour arriver à ce résultat.

Si on suppose que la matrice $\frac{\partial \mu}{\partial x}$ est diagonale, on a la relation suivante :

$$\frac{d\phi}{df} = \frac{\partial \phi}{\partial fv} + \sum_{i=1}^m \left[\frac{\partial \phi}{\partial kf_i} \frac{\partial \mu_i}{\partial x_i} \frac{dxf_i}{dfv} + \frac{\partial \phi}{\partial kf_i} \frac{\partial \mu_i}{\partial y_i} \frac{dyf_i}{dfv} \right]$$

En remplaçant ϕ par sa valeur et en permutant :

$$\sum_{i=1}^m \left[\frac{dyf_i}{dfv} \left(1 - \frac{\partial \phi}{\partial kf_i} \frac{\partial \mu_i}{\partial y_i} \right) - \frac{dxf_i}{dfv} \left(1 + \frac{\partial \phi}{\partial kf_i} \frac{\partial \mu_i}{\partial x_i} \right) \right] = \frac{\partial \phi}{\partial fv}$$

En utilisant la relation (I-8), et la propriété des coefficients d'activité d'être des fonctions décroissantes des concentrations, on obtient :

$$\frac{\partial \mu_i}{\partial y_i} > 0 > \frac{\partial \mu_i}{\partial x_i}$$

De plus on constate qu'en pratique, les termes $\frac{\partial \phi}{\partial kf_i} \frac{\partial \mu_i}{\partial y_i}$

et $\frac{\partial \phi}{\partial k f_i} \frac{\partial \mu_i}{\partial x_i}$ sont faibles devant l'unité, on n'altérera donc pas fortement

la valeur du premier membre en faisant l'hypothèse suivante :

$$\frac{\partial \mu_i}{\partial y_i} \approx - \frac{\partial \mu_i}{\partial x_i}$$

On obtient alors :

$$\sum_{i=1}^m \left[\left(\frac{dy_i}{dfv} - \frac{dx_i}{dfv} \right) \left(1 - \frac{\partial \phi}{\partial k f_i} \frac{\partial \mu_i}{\partial y_i} \right) \right] \approx \frac{\partial \phi}{\partial f v}$$

Soit tous calculs faits :

$$\frac{d\phi}{dfv} \approx \sum_{i=1}^m \left[\frac{f \cdot z f_i (k f_i - 1)^2}{f \cdot f v (k f_i - 1)^2} \right] + \frac{f^2 \cdot z f_i}{f + f v (k f_i - 1)^2} \cdot \frac{\partial \mu_i}{\partial y_i}$$

La dérivée $\frac{\partial \mu}{\partial y_i}$ étant, comme nous l'avons montré, positive, il est aisé de constater que tous les éléments de la somme du second membre sont négatifs, d'où

$$\frac{d\phi}{dfv} < 0$$

Cette propriété est vraie pour le domaine admissible de variation de $f v$, c'est-à-dire l'intervalle $[0, f]$. La solution est donc unique dans ce domaine.

Ces propriétés d'existence et d'unicité suffisent pour garantir la convergence de la méthode de MULLER.

On remarque que le choix de la fonction d'erreur $\phi(fv)$, tel qu'il a été effectué, procure un avantage certain sur le choix classique : $\phi = \sum y d_i - 1$, pour lequel ϕ^* comporte un extrémum dans l'intervalle $0, f$, et une solution triviale pour $f v = f$, {D15}.

Dans le second algorithme le test du début sépare les cas où la température $t f$ est extérieure à l'intervalle $]t_{eb, z f}, t_{cond, z f}[$ pour lesquels le calcul est alors direct. Quand la température $t f$ est dans l'intervalle $]t_{eb, z f}, t_{cond, z f}[$ on fait alors un raisonnement analogue à celui fait pour la boucle précédente. Si $\phi(t f)$ est la fonction d'erreur définie par :

$$\phi(t f) = h f_{calculé} - h f_{désiré}.$$

Les conditions extrêmes sont alors les suivantes :

$$\begin{aligned} \phi(tf) < 0 & \quad \text{pour } tf = t_{\text{cond},zf} \\ \phi(tf) > 0 & \quad \text{pour } tf = t_{\text{cond},zf} \end{aligned}$$

Par continuité il existe donc au moins une solution à l'équation $\phi(tf) = 0$ dans l'intervalle $]t_{eb,zf}, t_{\text{cond},zf}[$. De plus on sait que dans ces conditions (zf et p fixés) l'enthalpie globale est une fonction croissante de la température, dans l'intervalle considéré. La fonction $\phi(tf)$ est ainsi uniforme, et la solution est unique dans cet intervalle.

Cette propriété entraîne que la convergence par la méthode de MULLER est assurée. Remarquons de plus que les calculs d'équilibre du premier test et le calcul effectué sur la température interpolée fournissent les trois premiers points nécessaires à cette méthode.

En conclusion, il ressort des paragraphes III-2.1.c. et III-2.2.c. qu'on pourra employer les algorithmes de calcul d'équilibre décrits avec une très bonne sécurité en ce qui concerne l'existence et l'unicité des solutions ainsi que la convergence.

III-2.3. Calcul accéléré des équilibres liquide-vapeur.

Les calculs d'équilibre liquide-vapeur, qui comportent une itération multiple et des relations souvent complexes, sont relativement longs. Ils consomment en général une forte proportion du temps de calcul total de la colonne (plus de 95 pour cent dans les applications effectuées sur des mélanges d'hydrocarbures). Dans ces conditions un gain de temps obtenu dans ces calculs se reporte presque dans les mêmes proportions sur le temps total nécessaire au traitement de la colonne.

Nous proposons ici une méthode de calcul des équilibres qui n'altère pas la qualité du modèle des propriétés physiques des mélanges étudiés et qui diminue dans un rapport très appréciable le temps de calcul nécessaire. (voir aussi D.11).

Plaçons-nous dans le cas d'un calcul de point d'ébullition, et omettons l'indice j relatif au plateau. Si dans une étape du calcul on suppose connue la température t et la pression s , il suffit alors, les deux phases étant en équilibre, de connaître $(m-2)$ éléments du vecteur x des concentrations en phase liquide, soit $(x_i, i \neq i_1^t, i \neq i_2^t)$, pour que l'équilibre soit entièrement déterminé. Appelons \hat{x}^t le vecteur constitué par ces $(m-2)$ éléments. L'indice supérieur t indique que les indices i_1

et i_2 sont définis, comme nous le verrons, pour une température t , de même par conséquent que la constitution du vecteur \hat{x}^t .

Définissons, pour la température t , un état d'équilibre de référence correspondant à la pression de référence pr^t et au vecteur de référence $\hat{x}r^t$, et pour lequel on obtient le vecteur des coefficients d'équilibre de référence kr^t . Effectuons pour cette même température t un développement linéaire du vecteur des coefficients d'équilibre k^t en fonction des variables indépendantes p , \hat{x}^t , autour de l'équilibre de référence. On obtient :

$$(III-24) \quad k^t = kr^t + \left[\frac{\partial k^t}{\partial \hat{x}^t} \right]_{\hat{x}r^t, pr^t} (\hat{x}^t - \hat{x}r^t) + \left[\frac{\partial k^t}{\partial p} \right]_{\hat{x}r^t, pr^t} (p - pr^t)$$

où $\frac{\partial k^t}{\partial \hat{x}^t}$ est la matrice d'élément ij : $\frac{\partial k_i^t}{\partial \hat{x}_j^t}$

et $\frac{\partial k^t}{\partial p}$ est le vecteur d'élément i : $\frac{\partial k_i^t}{\partial p}$

Pour le point d'ébullition qu'on se propose de calculer, on connaît la pression p et le vecteur x . Si on choisit arbitrairement une température t , et si on suppose déterminé un état d'équilibre de référence correspondant à cette température, alors le calcul précédent peut être exécuté et fournit la valeur de k^t , (car en effet la pression p , et le vecteur \hat{x}^t sont connus). Mais en général, puisque t est arbitraire, la somme des concentrations $\bar{y}_i = k_i^t \cdot x_{im} \cdot \bar{y}^t$ de la phase vapeur n'est pas égale à 1. C'est précisément l'équation $\sum_{i=1} \bar{y}_i = 1$ qui permet de reconnaître si la température t est celle d'équilibre.

Si pour toute température t on connaissait un ensemble de données pr^t , $\hat{x}r^t$, kr^t , $\frac{\partial k^t}{\partial \hat{x}^t} \Big|_{\hat{x}r^t, pr^t}$, $\frac{\partial k^t}{\partial p} \Big|_{\hat{x}r^t, pr^t}$, on pourrait alors

calculer k^t , et la somme des concentrations en phase vapeur pour toute température, et ainsi déterminer itérativement la température et les autres paramètres inconnus de l'équilibre.

En réalité cette condition ne peut être remplie, et on disposera au contraire de ces données pour un ensemble fini de températures tr_i , qu'on appellera températures de référence. Dans ces conditions le calcul des paramètres inconnus de l'équilibre ne peut être effectué que par interpolation entre les températures les plus voisines de la température

d'équilibre.

L'algorithme de calcul donné sur la figure III.7.a, comprend alors deux phases :

1 - Recherche des deux températures de référence voisine tr_{i1} et tr_{i2} encadrant la température t d'équilibre. On doit obtenir, en supposant que $tr_{i1} < tr_{i2}$

$$(III-25) \quad \sum_{i=1}^m \frac{tr_{i1}}{y_i} < 1 < \sum_{i=1}^m \frac{tr_{i2}}{y_i}$$

2 - Interpolation entre tr_{i1} et tr_{i2} , et éventuellement $(n-1)$ autres températures voisines si l'interpolation est d'ordre n . Pour une interpolation linéaire on obtient les relations :

$$(III-26) \quad t = tr_{i1} + \left[\left(1 - \frac{\sum_{i=1}^m y_i tr_{i1}}{\sum_{i=1}^m y_i tr_{i2} - \sum_{i=1}^m y_i tr_{i1}} \right) (tr_{i2} - tr_{i1}) \right]$$

$$(III-27) \quad k = k^{tr_{i1}} + \left[\frac{(t - tr_{i1})}{(tr_{i2} - tr_{i1})} \right] (k^{tr_{i2}} - k^{tr_{i1}})$$

Il est possible de calculer les enthalpies des deux phases par le même procédé. Les équations correspondantes sont les suivantes :

$$(III-28) \quad hl^t = hl_{r^t} + \left[\frac{\partial hl^t}{\partial \hat{x}^t} \right]_{\hat{x}_{r^t}, p_{r^t}}^T (\hat{x}^t - x_{r^t}) + \left[\frac{\partial hl^t}{\partial p^t} \right]_{\hat{x}_{r^t}, p_{r^t}} (p - p_{r^t})$$

$$(III-29) \quad \overline{hw}^t = \overline{hw}_{r^t} + \left[\frac{\partial \overline{hw}^t}{\partial \hat{x}^t} \right]_{\hat{x}_{r^t}, p_{r^t}}^T (\hat{x}^t - x_{r^t}) + \left[\frac{\partial \overline{hw}^t}{\partial p^t} \right]_{\hat{x}_{r^t}, p_{r^t}} (p - p_{r^t})$$

$$(III-30) \quad hl = hl^{tr_{i1}} + \left[\frac{(t - tr_{i1})}{(tr_{i2} - tr_{i1})} \right] \cdot (hl^{tr_{i2}} - hl^{tr_{i1}})$$

$$(III-31) \quad hw = hw^{tr_{i1}} + \left[\frac{(t - tr_{i1})}{(tr_{i2} - tr_{i1})} \right] \cdot (hw^{tr_{i2}} - hw^{tr_{i1}})$$

Nous avons décrit cette méthode dans le cas d'un calcul de point d'ébullition. Elle peut évidemment aussi bien être mise en oeuvre pour un calcul de point de condensation. L'algorithme correspondant est donné sur la figure III.7.b. De même la figure III.8 donne l'algorithme d'un calcul d'état accéléré à température connue, l'algorithme à enthalpie connue gardant la même structure, employant simplement le précédent à la place de l'algorithme normal.

La mise en oeuvre pratique de cette méthode pour le calcul d'un état de la colonne implique la connaissance des données $p_r, \hat{x}_r, k_r, h_{lr}, \overline{h_{vr}}, \frac{\partial k}{\partial \hat{x}}, \frac{\partial k}{\partial p}, \frac{\partial h_l}{\partial \hat{x}}, \frac{\partial h_l}{\partial p}, \frac{\partial \overline{h_v}}{\partial \hat{x}}, \frac{\partial \overline{h_v}}{\partial p}$ pour un nombre suffisant de températures couvrant tout le domaine de variations possibles dans la colonne. De plus les états de référence choisis ne doivent pas être trop éloignés des états réels rencontrés aux températures correspondantes. Deux problèmes se posent ainsi : celui du choix des états de référence, et celui de la détermination et du stockage des coefficients d'équilibre de référence et des dérivées partielles correspondantes.

La résolution du premier nécessite une certaine connaissance a priori de la colonne étudiée. On possède souvent une partie de cette connaissance, et le choix est facilité si on fait disparaître des données de références, pour chaque température de référence, les deux composants apparaissant en quantité la plus importante à cette température, car en effet le choix des indices i_1^t et i_2^t est libre. Il pourra arriver cependant qu'on soit amené, pour obtenir cette connaissance suffisante de la colonne, à effectuer un calcul d'état préliminaire avec les programmes classiques de calcul d'équilibre.

Le calcul des coefficients d'équilibre de référence nécessite qu'on dispose d'un algorithme permettant le calcul d'un équilibre quand on connaît les variables t, p, \hat{x} (ou \hat{y}). Un tel algorithme est itératif, et fait usage des procédures classiques des paragraphes III-2.1. ou III-2.2. Les dérivées partielles sont alors évaluées à l'aide d'un calcul aux différences.

Le volume de mémoire nécessité par le stockage des données est relativement important. Pour un ordinateur de dimensions modestes, ce stockage peut cependant être effectué sans difficulté sur une mémoire auxiliaire (sur disque par exemple). L'estimation des coefficients d'équilibre de référence et des dérivées partielles nécessite un temps de calcul qui dans les applications que nous avons traitées peut être estimé à environ trois fois le temps moyen d'un calcul d'état de la colonne,

effectué à l'aide des algorithmes classiques des paragraphes III-2.1. et III-2. Remarquons de plus que, dans le cas où un calcul préliminaire de colonne est effectué, la détermination des états de référence, des coefficients d'équilibre et des dérivées partielles correspondantes peuvent être réalisés de façon entièrement automatique.

La mise en oeuvre de la méthode accélérée nécessite ainsi des calculs préliminaires. Par contre le temps de calcul d'un équilibre a été réduit dans un rapport de 6 environ, pour les applications que nous avons traitées (ce chiffre a été obtenu dans le cas d'un stockage sur disque. Il est sans doute beaucoup plus grand quand la dimension du calculateur permet un stockage en mémoire centrale.

Dans les conditions citées, il suffit alors d'effectuer au moins quatre calculs d'état de la colonne pour que le bilan de temps de calcul soit favorable à la méthode accélérée, chiffre presque toujours largement dépassé dans les travaux d'identification, d'optimisation ou de conception qui nécessitent ce genre de calcul.

Dans les applications effectuées, l'erreur introduite par la méthode accélérée par rapport à la méthode de base dont elle est issue est de moins de 0,03 °C sur les températures d'équilibre, de moins de 0,5 pour cent sur les coefficients d'équilibre, ce qui est très inférieur à l'incertitude des modèles physiques employés dans la méthode de base.

III-3. ALGORITHME DE REDUCTION. PARTIE COMMUNE.

Le choix de cette partie de l'algorithme de réduction est fondamental, car c'est lui qui détermine l'ordre de grandeur de la dimension du vecteur d'itération.

Comme on peut le remarquer dans la partie II, où nous avons donné une description des principales méthodes existantes, ordonnées précisément selon la classe de méthodes de réduction employée, c'est la méthode de LEWIS et MATHESON, sous l'une des formes proposées par DAVIS et SOBEL et par GREENSTADT et col., qui peut conduire au vecteur d'itération de plus faible dimension. Nous verrons en effet que, selon les cas, celle-ci peut être de l'ordre de grandeur du nombre de composants ou de deux fois ce nombre.

C'est cette méthode que nous avons retenue. Nous en décrivons les deux versions citées, qui sont équivalentes en ce qui concerne la dimension du vecteur d'itération, et qui peuvent être employées indifférem-

ment dans le cadre de la méthode proposée.

III-3.1. Calcul d'un plateau j courant par la méthode de DAVIS et SOBEL.

Deux possibilités se présentent pour le calcul du plateau courant par la méthode de DAVIS et SOBEL {D9} , suivant si on connaît les données relatives au plateau ($j-1$) ou au plateau ($j+1$). Nous décrivons successivement le calcul correspondant à ces deux cas qui seront ensuite ceux des plateaux de la section supérieure et de la section inférieure respectivement.

III-3.1.a. Plateau ($j-1$) connu.

Les quantités connues du calcul sont dans ce cas la pression p , les variables relatives au soutirage de tête : y_d, d, hvd , et celles relatives au plateau ($j-1$), soit x_{j-1}, hl_{j-1} . On se propose de déterminer les quantités $l_{j-1}, v_j, y_j, \overline{x_j}, x_j, hw_j, \overline{hl_j}, hl_j, t_j$.

Les équations utilisées sont les équations (I-23), (I-24), (I-29), (I-30) à (I-32), (I-36), (I-37), (I-41), (I-45). L'algorithme de résolution proposé par DAVIS et SOBEL {D9} , donné sur la figure III.9.a, comporte une itération sur le débit l_{j-1} . Si une première estimation de ce dernier est supposée connue, le calcul se déroule comme suit :

- 1 - Détermination de v_j, y_j - équations (I-23), (I-24)
- 2 - Calcul du point de condensation correspondant à y_j - algorithme donné aux paragraphes III-2.2. ou III-2.4. On obtient $\overline{x_j}, \overline{hl_j}, hw_j$
- 3 - Calcul de x_j, hl_j - équations (I-41), (I-45)
- 4 - Test déterminant si l'équation (I-28) est vérifiée. Si tel est le cas le calcul du plateau est terminé. Dans le cas contraire une correction est effectuée sur le débit l_{j-1} par la méthode de MULLER, et le calcul est repris en 1 .

On remarque que le calcul du plateau j fournit tous les éléments qui permettront de calculer de façon identique le plateau $j+1$.

III-3.1.b. Plateau $j+1$ connu.

Dans ce calcul, les variables connues sont $p, b, hlb, y_{j+1}, hv_{j+1}$, et les variables calculées $v_{j+1}, l_j, \bar{y}_j, y_j, hl_j, \bar{hw}_j, hw_j$.

Le calcul utilise les équations (I-25), (I-26), (I-29), (I-33) à (I-35), (I-38), (I-39), (I-43), (I-47). L'algorithme employé, donné sur la figure III.9.b., est en tout point analogue au précédent, et possède les mêmes propriétés.

III-3.1.c. Existence et unicité de la solution, sécurité de convergence.

Plaçons-nous dans le cas du paragraphe III-3.1.a. (Il est clair qu'une étude analogue mettrait les mêmes propriétés en évidence dans le cas du paragraphe III-3.1.b.). On peut tout d'abord facilement observer, d'après les relations (I-23) et (I-24) que si l_{j-1}, d , les éléments de x_{j-1} et de yd sont positifs, il en est de même pour v_j et les éléments de y_j . Le calcul du point de condensation donne alors un vecteur \bar{x}_j dont les éléments sont positifs, et si les coefficients du vecteur d'efficacité e_j sont compris entre 0 et 1, les éléments de x sont eux-mêmes nécessairement positifs. Si, de plus, on remarque que les éléments de x_1 sont nécessairement positifs (équilibre sur le plateau 1), alors par récurrence toutes les concentrations calculées sont positives. Enfin, si la somme des éléments de yd est égale à 1, on peut vérifier que la somme des concentrations de chaque phase de chaque plateau est égale à 1. Dans ces conditions toutes les concentrations calculées sont comprises entre 0 et 1.

La seule condition incertaine est la condition $l_{j-1} > 0$ nous allons montrer maintenant que la solution pour l_{j-1} existe et qu'elle est unique dans le domaine $[0, \infty]$. Nous supposons successivement que $l_{j-1} = 0$ puis $l_{j-1} \rightarrow \infty$.

$$1 \quad l_{j-1} = 0. \text{ Ceci entraîne } v_j = d \quad (I-23) \text{ et } y_j = yd \quad (I-24)$$

Soit ϕ la fonction d'erreur sur le bilan enthalpique, définie par :

$$(III-32) \quad \phi(l_{j-1}) = qc + v_j \cdot hw_j - d \cdot hvd - l_{j-1} \cdot hl_{j-1}$$

(équation I-28)

En appliquant cette relation dans le cas présent :

$$\phi(0) = qc$$

La quantité qc étant négative (quantité de chaleur fournie par le condenseur) on obtient, pour $l_{j-1} = 0$:

$$(III-33) \quad \phi(0) < 0$$

2 $l_{j-1} \rightarrow \infty$ On a dans ce cas :

$$v_j = l_{j-1} + d \quad (I-23) \text{ et } y_j = x_{j-1} \quad (I-24)$$

d'où

$$\phi(l_{j-1}) = qc + l_{j-1}(hw_j - hl_{j-1}) + d(hw_j - hvd)$$

On sait que, dans une colonne, $hw_j > hw_{j-1} > hl_{j-1}$. Dans ces conditions le terme $l_{j-1}(hw_j - hl_{j-1})$ est positif. D'autre part, l_{j-1} étant aussi grand qu'on veut, ce terme devient prépondérant dans l'expression de $\phi(\infty)$. D'où

$$\phi(\infty) \simeq l_{j-1}(hw_j - hl_{j-1})$$

et

$$(III-34) \quad \phi(\infty) > 0$$

Les fonctions mises en jeu dans ces calculs (bilans matériels, enthalpiques, modèle physique) étant continues il est possible d'affirmer d'après les relations (III-33) et (III-34), qu'il existe au moins une valeur positive de l_{j-1} telle que l'équation (I-28) soit vérifiée.

Montrons maintenant que la fonction $\phi(l_{j-1})$ est uniformément croissante pour les valeurs positives de l_{j-1} . Tirons la dérivée $\frac{d\phi}{dl_{j-1}}$

de l'équation (III-28). En remarquant que hl_{j-1} est une constante, et que $v_j = l_{j-1} + d$, on obtient :

$$\frac{d\phi}{dl_{j-1}} = hw_j - hl_{j-1} + v_j \frac{dhw_j}{dl_{j-1}}$$

Développons la dérivée apparaissant au second membre

$$\frac{dhw_j}{dl_{j-1}} = \left[\frac{\partial hw_j}{\partial y_j} \right]^T \cdot \frac{dy_j}{dl_{j-1}}$$

or

$$y_j = (d \cdot y_d + l_{j-1} \cdot x_{j-1}) / v_j$$

$$\text{d'où } \frac{d h v_j}{d l_j} = - \left[\frac{\partial h v_j}{\partial y_j} \right]^T \cdot \frac{d}{v_j^2} (y_d - x_{j-1})$$

On obtient ainsi :

$$\frac{d \phi}{d l_{j-1}} = h v_j - h l_{j-1} - \frac{d}{v_j} \cdot \left[\frac{\partial h v_j}{\partial y_j} \right]^T (y_d - x_{j-1})$$

Comme précédemment on a $h v_j > h v_{j-1} > h l_{j-1}$ d'où

$$h v_j - h l_{j-1} > 0$$

De plus examinons les éléments du produit scalaire du second membre. Pour un composant léger on a :

$$y_d > x_{i1} > x_{i,j-1}, \quad \frac{\partial h v_j}{\partial y_{i,j}} < 0$$

Pour un composant lourd :

$$y_d < x_{i1} < x_{i,j-1}, \quad \frac{\partial h v_j}{\partial y_{i,j}} > 0$$

Ces inégalités découlent des propriétés physiques des mélanges, et du fonctionnement d'une colonne de distillation. Les débits d et v_j étant positifs, le produit scalaire $\frac{d}{v_j} \cdot \left[\frac{\partial h v_j}{\partial y_j} \right]^T (y_d - x_{j-1})$, dont tous les éléments sont négatifs, est négatif. On peut donc en conclure que la dérivée $\frac{d \phi}{d l_{j-1}}$ est positive.

$$\frac{d \phi}{d l_{j-1}} > 0$$

La fonction $\phi(l_{j-1})$ est uniformément croissante. La solution l_{j-1} de l'équation (I-11) est donc unique dans l'intervalle $[0, +\infty]$.

Une nouvelle fois les propriétés d'existence et d'unicité de la solution dans le domaine admissible garantissent la convergence de la méthode de MULLER.

Si on emploie la méthode modifiée décrite en annexe, pour être sûr qu'une valeur de l_{j-1} calculée en cours d'itération

ne puisse être négative, on peut faire la transformation de variable suivante :

$$z_{j-1}^* = \text{Log}(z_{j-1})$$

Le calcul itératif est alors effectué sur z_{j-1}^* qui peut varier dans tout l'intervalle $[-\infty +\infty]$.

Le calcul du plateau j défini dans les paragraphes III-3.1.a et III-3.1.b. est donc, à toutes les étapes, d'une grande fiabilité.

Dans les applications traitées, avec une valeur initiale de z_{j-1} (ou v_{j+1}) fournie par une interpolation effectuée sur z_{j-2} et z_{j-3} (ou v_{j+2} et v_{j+3}), le calcul nécessite généralement de une à trois itérations.

III-3.2. Calcul du plateau par la méthode de GREENSTADT, BARD et MORSE.

Dans la méthode proposée par GREENSTADT, BARD et MORSE {D13}, les itérations imbriquées que représentent le calcul d'équilibre et le calcul des débits sont remplacées par une itération unique dans laquelle l'ensemble des équations est résolu à l'aide de la méthode de NEWTON.

Dans le cas où le plateau $j-1$ est connu, les équations mises en jeu dans la boucle sont (I-23), (I-24), (I-28), (I-30) à (I-32), (I-36), (I-37). Il est clair que si les variables $\bar{x}_j, y_j, z_j, v_j, t$ (au nombre de $2m+3$) sont supposées connues (et forment le vecteur d'itération), les équations (I-31), (I-36) et (I-37) peuvent être résolues en $k_j, \bar{h}l_j, hv_j$, et l'erreur sur les autres équations (au nombre de $2m+3$) constitue le vecteur d'erreur. La méthode de NEWTON est employée pour corriger le vecteur d'itération tant que le vecteur d'erreur n'est pas suffisamment faible. Quand la solution est atteinte, les équations (I-41) et (I-45) permettent d'obtenir x_j et hl_j . Une procédure symétrique est applicable dans le cas où c'est le plateau $j+1$ qui est connu.

Remarquons que les propriétés d'existence et d'unicité de la solution sont identiques à celle du cas précédent, les données, les équations et les variables calculées étant identiques.

Cette méthode, équivalente à celle de DAVIS et SOBEL quant au déroulement général de l'algorithme de réduction est apparue moins rapide que cette dernière dans des tests que nous avons effectués, mais il semble possible d'en améliorer les performances. Elle présente cependant l'inconvénient de ne pas permettre le calcul simplifié décrit au paragraphe III-2.3., dont nous avons montré l'intérêt dans le cas où de nombreux calculs d'état de la colonne doivent être effectués. Dans les applications traitées, nous avons toujours employé la procédure de DAVIS et SOBEL.

III-3.3. Calcul des sections de la colonne.

Les bilans matériels et enthalpiques de la colonne complète fournissent des relations entre les conditions régnant aux extrémités et à l'alimentation. Si on veut employer ces équations (I-21), (I-22), (I-27) directement dans la phase de réduction, il convient d'effectuer le calcul des deux sections de la colonne des extrémités vers l'alimentation, de façon à ce que les variables intervenant dans les équations précédentes soient des variables d'entrée pour ce calcul des sections.

Nous verrons de plus que les plateaux 1, 2, jt seront calculés dans la partie multiple de l'algorithme de subrésolution. Le calcul des sections consiste donc en la détermination des variables relatives aux plateaux 3 à jf_{-1} pour la section supérieure, jt_{-1} à jf pour la section inférieure.

Dans ces conditions, si on suppose connues les variables $p, d, y_d, hvd, x_2, hl_2$ il est possible, en utilisant l'algorithme décrit dans le paragraphe III-3.1.a, de calculer successivement, dans l'ordre décroissant cette fois, les plateaux de jt_{-1} à jf inclus (section inférieure).

Les algorithmes correspondants, donnés sur les figures III.10.a et III.10.b, sont très simples.

Les variables déterminées au cours de ces calculs sont

$$(l_{j+1}, v_j, y_j, \bar{x}_j, x_j, hw_j, hl_j, \bar{hl}_j, t_j) \text{ pour } j = 3, jf_{-1}$$

$$(w_{j+1}, l_j, x_j, \bar{y}_j, y_j, hl_j, \bar{hw}_j, hw_j, t_j) \text{ pour } j = jt_{-1}, jf$$

III-3.4. Calcul de l'état de l'alimentation.

Le calcul du plateau d'alimentation nécessite la connaissance des variables fl , fv , xf , yf , hlf , hvf , c'est-à-dire de l'état de l'alimentation.

Si on suppose connus f , zf , hf , le calcul de ces variables correspond exactement au cas défini au paragraphe III.2.2.b. L'algorithme employé est celui de la figure III.6.b, qui fait usage de l'algorithme de la figure III.6.a (calcul normal) ou de celui de la figure III.8 (calcul accéléré).

III-3.5. Calcul du plateau d'alimentation.

A partir des calculs précédents, sont connus, concernant le plateau d'alimentation, les variables fl , fv , xf , yf , hlf , hvf , x_{jf-1} , h_{jf-1} , t_{jf-1} , y_{jf} , h_{jf} , t_{jf} . Les équations disponibles sont les équations (I-65) à (I-76) et les variables calculées sont les débits vsf , lif , v_{jf} , l_{jf-1} , les enthalpies $hvsf$, $hlif$, les vecteurs des concentrations ysf , xif .

Le vecteur d'itération ayant été choisi de façon arbitraire, il n'est généralement pas possible que toutes les équations soient vérifiées, ce qu'on peut constater en remarquant qu'on dispose de $(3m+6)$ relations (compte-tenu des redondances dont nous avons parlé au paragraphe I-4.7.) pour seulement $(2m+6)$ variables inconnues. Ceci permettra de déterminer les variables constituant la partie fondamentale du vecteur d'erreur.

Pour faire apparaître ces variables, nous allons effectuer des estimations des variables l_{jf-1} , v_{jf} , vsf , ysf . Ces estimations calculées à partir des sections supérieure et inférieures, sont respectivement l_{jf-1} , $vifd$, $vsfd$, $ysfd$, d'une part, et $lsfb$, v_{jf} , $vsfb$, $ysfb$, d'autre part. Nous décrivons d'abord les algorithmes de calcul de ces variables, ensuite la construction de la partie fondamentale du vecteur d'erreur à partir de leur valeur.

Remarquons que le choix de ysf pour effectuer ces deux estimations est arbitraire. Le vecteur xif aurait tout aussi bien pu être choisi. Dans la pratique, on choisira plutôt ysf quand fv est faible, xif quand, au contraire, fv est prépondérant.

III-3.5.a. Calcul de $ysfd$, l_{jf-1} , $vsfd$, $vifd$.

L'algorithme de calcul est donné sur la figure III.11.a. Il ressemble à celui servant au calcul d'un plateau normal, et se déroule de la façon suivante, si on dispose d'une première estimation de l_{j-1} et si x_{jf-1} , hl_{jf-1} , fv , hvf , hw_{jf} sont connus :

- 1 - Calcul de $vsfd$, $ysfd$, $vifd$ - équations (I-65), (I-66), (I-68)
- 2 - Calcul de $hvsfd$ - équation (I-70)
- 3 - Test sur le bilan enthalpique - équation (I-67). Si le bilan est correct le calcul de $ysfd$ est terminé, sinon le débit l_{jf-1} est corrigé par la méthode de MULLER et le calcul est repris en 1.

III-3.5.b. Calcul de $vsfb$, $ysfb$, v_{jf} , $lsfb$.

L'algorithme est donné sur la figure III-10.b. Différant très peu du précédent, il se déroule de la façon suivante, si on dispose d'une première estimation de v_{jf} et si y_{jf} , hw_{jf} , fv , hvf , hl_{jf-1} sont connues :

- 1 - Calcul de $vsfb$, $ysfb$, $lsfb$ - équations (I-68), (I-69), (I-71), (I-74)
- 2 - Calcul de $hlif$ - équation (I-76)
- 3 - Test sur le bilan enthalpique - équation (I-73). Si le bilan est correct, le calcul de $ysfb$ est terminé, sinon le débit v_{jf} est corrigé par la méthode de MULLER et le calcul est repris en 1.

III-3.5.c. Existence et unicité de la solution. Sécurité de la convergence.

Examinons tout d'abord le cas du calcul de $ysfd$, $vsfd$, l_{jf-1} , $vifd$. La fonction d'erreur de la boucle de convergence est :

$$\phi(l_{jf-1}) = qc + vsfd \cdot hvsfd - l_{jf-1} \cdot hl_{jf-1} - d \cdot hvd$$

En utilisant les équations (I-65), (I-59), (I-69), on obtient :

$$\phi(l_{jf-1}) = qc + fv(hvf - hw_{jf}) + l_{jf-1}(hw_{jf} - hl_{jf-1}) + d(hw_{jf} - hvd)$$

Envisageons le cas où $z_{jf-1} = 0$. Du calcul du plateau 2 on tire :

$$qc = -z_1 \cdot (hw_2 - hl_1) - d \cdot (hw_2 - hwd)$$

d'où, pour $z_{jf-1} = 0$

$$\phi(0) = -z_1 \cdot (hw_2 - hl_1) + fv \cdot (hw_f - hw_{jf}) + d \cdot (hw_{jf} - hw_2)$$

Si le vecteur d'itération n'est pas trop éloigné de la solution la différence $(hw_f - hw_{jf})$ est normalement très faible. D'où, en négligeant le second terme :

$$\phi(0) \simeq -z_1 \cdot (hw_2 - hl_1) + d \cdot (hw_{jf} - hw_2)$$

Le signe de $\phi(0)$ peut théoriquement être quelconque. Mais pratiquement, si on remarque que le taux de reflux z_1/d est rarement très faible par rapport à 1, et que la différence entre les enthalpies des phases vapeur et liquide (enthalpie de vaporisation) est généralement grande devant les variations d'enthalpie vapeur dues aux variations de température, on peut dans la pratique affirmer que $\phi(0)$ est négatif.

Si au contraire on envisage le cas de z_{jf-1} tend vers l'infini le terme $z_{jf-1} \cdot (hw_{jf} - hl_{jf-1})$ devient prépondérant dans l'expression de ϕ . Or on sait que $hw_{jf} > hl_{jf-1}$, $\phi(\infty)$ est donc positif.

Par continuité il existe donc généralement une valeur positive de z_{jf-1} telle que $\phi(z_{jf-1}) = 0$. On en déduit, de la même façon que pour un plateau courant, que $vsft$ est positif et que les éléments de $ysft$ sont tous compris entre 0 et 1.

Tirons maintenant la dérivée $d\phi(z_{jf-1})/dz_{jf-1}$ de l'expression de ϕ :

$$\frac{d\phi}{dz_{jf-1}} = hw_{jf} - hl_{jf}$$

Cette dérivée est toujours positive, la fonction $\phi(z_{jf-1})$ est monotone dans l'intervalle $[0, \infty]$, la solution est donc unique.

Cette propriété entraîne de plus que la convergence par la méthode de MULLER est assurée.

Par une étude analogue on montrerait les mêmes propriétés pour le calcul de $ysfb$, $vsfb$, $lsfb$.

111-3.6. Vecteur d'erreur. Partie fondamentale.

Comme nous venons de le voir, le calcul du plateau d'alimentation fournit deux estimations des variables ysf , vsf , v_{jf} , l_{jf-1} . Le système complet d'équations du modèle est vérifié si ces deux estimations sont identiques. D'où la possibilité de construire la partie fondamentale du vecteur d'erreur à partir de ces deux estimations.

Nous allons d'abord montrer que la concordance entre les deux estimations d'un débit entraîne la même propriété pour les deux autres débits, puis que la concordance des concentrations entraîne celle de toutes les variables. Supposons que $vifd = v_{jf}$. On sait que $vifd = vsfd - fv$ et $vsfb = v_{jf} + fv$

$$\text{d'où} \quad vsfb = vsfb$$

L'application de l'équation (11-68) dans le cas des paragraphes 111-3.5.a et 111-3.5.b donne :

$$\begin{aligned} vifd &= vsfd - fv \\ vsfb &= v_{jf} + fv \\ \text{d'où} \quad vsfb &= vsfd \\ \text{de même} \quad l_{j-1} &= vsfd - d && (1-65) \\ &= vsfb - f + b && (1-24) \text{ et relation précédem-} \\ &= v_{jf} - fl + b && (1-58), (1-68) \text{ ment démontrée} \\ &= lif - fl && (1-71) \\ \text{or} \quad lsf &= lif - fl \\ \text{d'où} \quad l_{j-1} &= lsf \end{aligned}$$

Supposons maintenant que $ysfd = ysfb$. On a

$$\begin{aligned} v_{jf} \cdot hv_{jf} &= lif \cdot hlf - b \cdot hlb + qb && (1-73) \\ &= l_{j-1} \cdot hl_j + fl \cdot hlf - b \cdot hlb + qb && (1-75) \\ &= l_{j-1} \cdot hl_{j-1} + fl \cdot hlf - f \cdot hf + d \cdot hvd - qc && (1-27) \\ &= vsfd \cdot hvsfd - fv \cdot hvf && (1-62), (1-67) \end{aligned}$$

$$\text{Or} \quad vid \cdot hv_{jf} = vsfd \cdot hvsfd - fv \cdot hvf \quad (1-69)$$

d'où $vid = v_{jf}$

Ce qui entraîne

$$\begin{aligned} vsfd &= vsfb \\ z_{jf-1} &= z_{sfb} \end{aligned}$$

Dans ces conditions il suffit que les deux vecteurs de concentrations $ysfd$ et $ysfb$ soient égaux pour que toutes les équations soient vérifiées. Nous verrons de plus que les vecteurs $y\bar{a}$ et $y\bar{b}$ sont choisis, dans la partie multiple, tels que

$$\sum_{i=1}^m y\bar{a}_i = 1 \quad \text{et} \quad \sum_{i=1}^m x\bar{b}_i = 1$$

Ceci entraîne que tous les vecteurs de concentrations calculés sont tels que la somme de leurs éléments soit égale à l'unité. Cette propriété est vraie en particulier pour $ysfd$ et $ysfb$.

Il est alors suffisant que $(m-1)$ éléments de ces deux vecteurs soient égaux deux à deux pour que les deux éléments restants le soient aussi. D'où la condition

$$ysfd_i = ysfb_i, \quad i=1, m-1$$

Si on suppose que l'élément non utilisé est l'élément m .

La partie fondamentale du vecteur d'erreur est alors composée de $(m-1)$ éléments w_i fonction des concentrations $ysfd_i$, $ysfb_i$ avec la condition suivante :

$$\begin{aligned} w_i &= 0 & \text{quand} & \quad ysf\bar{d}_i = ysf\bar{b}_i \\ w_i &\neq 0 & \text{quand} & \quad ysf\bar{d}_i \neq ysf\bar{b}_i \end{aligned}$$

Dans les applications nous avons choisi la fonction

$$w_i = \text{Log} \frac{ysf\bar{d}_i}{ysf\bar{b}_i}$$

Remarquons que les éléments w_i sont toujours calculables, car en effet, comme nous le verrons, les éléments de $y\bar{a}$ et $x\bar{b}$ calculés dans la partie multiple sont toujours positifs, ce qui entraîne la même propriété pour les concentrations $ysf\bar{d}_i$ et $ysf\bar{b}_i$.

On vérifiera, dans la partie multiple, que le vecteur d'itération minimal est bien de dimension $(m-1)$ comme la partie fondamentale de

de que nous venons de définir.

III-3.7. Vecteur d'entrée de la partie commune.

Les variables qu'il est nécessaire de connaître pour pouvoir exécuter le calcul de la partie commune tel que nous l'avons décrit, sont celles nécessaires au calcul des sections et au calcul de l'état de l'alimentation, c'est-à-dire les variables suivantes : $p, f, hf, zf, d, b, yd, xb, hvd, hlb, qc, qb, x_2, hl_2, y_{jt}, hv_{jt}^E$, soit $nsf = (5m+11+ne)$ variables.

III-4. SUBRESOLUTION. PARTIE MULTIPLE.

III-4.1. Position du problème.

III-4.1.a. Equations, variables, dimension du vecteur d'entrée.

Les équations non utilisées dans la partie commune sont celles des bilans matériels et enthalpiques de la colonne complète, et celles permettant de calculer les plateaux 1, 2, et jt . Ce sont les équations suivantes :

(I-21), (I-22), (I-27).

(I-23), (I-24), (I-28), (I-30) à (I-32), (I-36), (I-37), pour $j = 1, 2$
(I-40), (I-47)

(I-41), (I-45) pour $= 2$

(I-25), (I-27), (I-29), (I-33) à (I-35), (I-38), (I-39), pour $j = jt$
(I-42), (I-46)

De plus quand le système complet des équations du modèle est satisfait la somme des concentrations du soutirage de tête est égale à 1 et de même celle du soutirage de fond. Nous ajouterons donc à celles rappelées ci-dessus l'équation suivante :

$$(III-35) \quad \sum_{i=1}^m yd_i = 1$$

qui entraîne, du fait de (I-21), (I-22) et (I-38), en supposant que $b \neq 0$, que les relations suivantes vérifiées.

$$\sum_{i=1}^m x_{ij} = 1 \quad , \quad j = jf, jt$$

$$\sum_{i=1}^m y_{ij} = 1 \quad , \quad j = 2, jf-1$$

$$\sum_{i=1}^m ysf d_i = 1$$

et en particulier

$$(III-36) \quad \sum_{i=1}^m x b_i = 1$$

Avec l'équation (III-35), nous disposons ainsi de $(8m+18)$ équations. Celles-ci font intervenir, en plus des variables d'entrée de la partie commune de la subrésolution, les variables suivantes : $\bar{x}_1, \bar{hl}_1, t_1, x_1, hl_1, y_2, hw_2, t_2, \bar{x}_2, \bar{hl}_2, l_1, v_2, \bar{y}_{jt}, hw_{jt}, t_{jt}$, soit $(5m+10)$ variables. Le nombre total des variables mises en jeu dans cette partie est ainsi de $(10m + 21+ne)$.

Le vecteur d'entrée s de l'algorithme de réduction est donc formé de $(2m+3+ne)$ variables choisies parmi celles citées précédemment : $ns = 2m+3+ne$.

III-4.1.b. Constitution du vecteur d'entrée.

Trois groupes peuvent être distingués parmi ces variables selon le rôle qu'elles peuvent jouer dans le calcul de la partie multiple:

1 - Les variables p, E au nombre de $(1+ ne)$ doivent obligatoirement être connues pour qu'on puisse effectuer le calcul. Elles figurent donc nécessairement dans le vecteur d'entrée.

2 - Certaines variables, au contraire, qui sont forcément des résultats de calcul, ou dont l'inclusion dans le vecteur d'entrée ne présente que peu d'intérêt, ne font jamais partie de ce vecteur. Ce sont $\bar{x}_1, \bar{hl}_1, t_1,$

$x_1, hl_1, hvd, y_2, v_2, hv_2, t_2, \bar{x}_2, \bar{hl}_2, x_2, hl_2, \bar{y}_{jt}, \bar{hw}_{jff}, t_{jff}, y_{jt}, y_{jt}, hw_{jt}, hlb$ (soit $7m + 13$ variables).

3 - Enfin les variables $f, zf, hf, yd, xb, d, b, lr, qc, qb$, (au nombre de $3m+7$) peuvent, selon les cas, être calculées ou faire partie du vecteur d'entrée.

Le vecteur d'entrée est ainsi constitué des $(1 + ne)$ variables du premier groupe et de $(2m + 2)$ variables choisies parmi les $(3m + 7)$ du troisième groupe.

Pour définir la partie multiple de l'algorithme de réduction, il faut alors déterminer, parmi les combinaisons de $(2m + 2)$ variables du troisième groupe, celles susceptibles de former avec le premier groupe un vecteur d'entrée acceptable, et fournir l'algorithme de calcul correspondant à chacune des combinaisons retenues.

Pour simplifier le problème, nous considérerons tout d'abord les cas où les variables f, zf, hf font partie du vecteur d'entrée (paragraphes III-4.2 à III-4.5.), puis les modifications à apporter aux résultats acquis dans le cas où cette condition n'est pas réalisée.

III-4.2. Combinaisons incompatibles (f, zf, hf connus).

Du fait de la relation (I-48), f, zf, hf sont déterminés par la connaissance de $(m+1)$ variables indépendantes. Quand ils sont connus, il reste alors à choisir $(m+1)$ variables parmi d, b, yd, yb, lr, qb, qc .

Toutes les combinaisons théoriquement envisageables ne sont pas possibles, du fait d'équations reliant certaines variables entre elles, et créant de ce fait des restrictions. Nous énumérons ci-après les groupes de variables qu'on ne peut pas choisir simultanément quand f, zf, hf sont connus. Ce sont :

- 1 - d et b qui sont reliés par l'équation (I-24)
- 2 - $yd_i, i=1, m$ équation (I-29)
- 3 - $xb_i, i=1, m$ équations (I-29), (I-48), (I-21), (I-22)
- 4 - d, xb_{ic}, yd_{ic} équations (I-21), (I-22)

5 - $xb_{ic1}, xb_{ic2}, yd_{ic1}, yd_{ic2}$ équations (I-21), (I-22)

6 - $(m+1)$ variables parmi xb, yd équations (I-21), (I-22)

La propriété d'incompatibilité existe dans le cas de la réunion d'un ou plusieurs de ces groupes avec tout autre groupe de variables.

Dans ce qui suit nous supposons toujours implicitement que les conditions précédentes sont remplies, et que par conséquent les combinaisons incompatibles ont été éliminées.

Nous allons maintenant envisager les différentes combinaisons possibles, en les classant selon leur constitution vis à vis des deux groupes de variables suivants : d, b, yd, xb et lr, qc, qb , et proposer, pour chaque cas, la méthode de calcul correspondante. L'algorithme général du calcul est donné sur la figure III.12.

Remarquons, avant de continuer, que d et b sont équivalents dans la relation (I-21). Dans ce qui suit quand nous écrivons d connu, il est toujours sous entendu que d peut être remplacé par b . Nous avons vu de même au paragraphe III-2.2. que la connaissance de tf et hf est équivalente, nous écrivons de même toujours hf à la place de $(hf$ ou $tf)$.

III-4.3. f, zf, hf, m variables parmi (d, b, yd, xb) et une variable parmi (lr, qc, qb) sont connues).

Dans le cas de cette répartition des variables connues, le calcul peut être mené en deux phases distinctes et successives : détermination des variables inconnues du groupe (d, b, yd, xb) , puis détermination des autres variables dépendantes.

III-4.3.a. Calcul des éléments inconnus de (d, b, yd, xb) .

Trois classes de combinaisons de m variables du groupe (d, b, yd, xb) peuvent être distinguées, à chacune d'elle correspondant un mode de calcul des variables dépendantes, et elles sont repérées par les lettres A, B, C dans l'algorithme de la figure III.12. Il est aisé de vérifier, compte-tenu des incompatibilités décrites précédemment, que ce sont les seules combinaisons possibles.

Classe A: \bar{d} et $(y\bar{d}_i$ ou $x\bar{b}_i, i \neq in)$ sont connus. Le déroulement du calcul est le suivant :

1. Détermination de b - équation (I-21)
2. Détermination des éléments inconnus de $(x\bar{b}_i$ ou $y\bar{d}_i, i \neq in)$ - équation (I-22)
3. Détermination de $y\bar{d}_{in}$ et $x\bar{b}_{in}$ - équations (III-35), (III-36)

Classe B: $y\bar{d}_{ic}, x\bar{b}_{ic}$ et $(y\bar{d}_i$ ou $x\bar{b}_i, i \neq in, i \neq ic)$ sont connus. Le mode de calcul est proche du précédent :

1. Détermination de \bar{d} et b - équations (I-21), (I-22) appliquées à ic
2. Détermination des éléments inconnus de $(x\bar{b}_i$ ou $y\bar{d}_i, i \neq in, i \neq ic)$ - équation (I-22)
3. Détermination de $y\bar{d}_{in}, x\bar{b}_{in}$ - équations (III-35), (III-36)

Classe C: $(y\bar{d}_i$ ou $x\bar{b}_i, i=1, m)$ sont connus. Dans ce cas le calcul est itératif. Si on dispose d'une première estimation de \bar{d} il se déroule de la façon suivante :

1. Détermination de b - équation (I-21)
2. Détermination des éléments inconnus de $(x\bar{b}_i$ ou $y\bar{d}_i, i = 1, m)$ - équation (I-22)
3. Test pour savoir si l'équation (III-35) est vérifiée. Si tel est le cas, le calcul est terminé, sinon \bar{d} est corrigé à l'aide de la méthode de MULLER, et le calcul est repris en 1.

III-4.3.b. Calcul des variables dépendantes restantes.

Trois cas, repérés dans l'algorithme par α, β, γ , se présentent à nouveau, selon que c'est la variable lr, qc ou qb qui est connue, et peuvent se combiner avec chacun des cas du calcul précédent.

Cas α : lr est connu. Le déroulement du calcul est le suivant.

1. Détermination de $\bar{x}_1, \bar{hvd}, \bar{hl}_1, t$ point de condensation effectué sur $y\bar{d}$
2. Détermination de \bar{x}_1, \bar{hl}_1 - équations (I-40), (I-44)
3. Détermination de $\bar{y}_{jt}, \bar{h1b}, \bar{hw}_{jt}, t_{jf}$ - point d'ébullition effectué sur $x\bar{b}$

4. Détermination de y_{jt}, hv_{jt} - équations (I-42), (I-46)
5. Détermination de v_2, y_2 - équations (I-23), (I-24) pour $j = 2$
6. Détermination de $\bar{x}_2, hv_2, \bar{hl}_2, t_2$ - point de condensation sur y_2
7. Détermination de x_2, hl_2 - équations (I-41), (I-45) pour $j = 2$
8. Détermination de qc - équation (I-28) pour $j = 1$
9. Détermination de qb - équation (I-27)

Cas β : qc est connu. Les étapes 1. 2. 3. 4. de ce calcul sont identiques aux étapes correspondantes du cas α .

5. Détermination de qb - équation (I-27)
6. Détermination de $lr, v_2, y_2, \bar{x}_2, x_2, hv_2, \bar{hl}_2, hl_2, t_2$ par un calcul normal du plateau 2 (algorithme du paragraphe III-3.1.a.)

Cas γ : qb est connu. Le calcul se déroule de la même façon que pour le cas β , la seule différence étant que qc est calculé au lieu de qb à l'étape 5.

On remarquera que tant dans le paragraphe III-4.3.a. que dans le III-4.3.b., les trois cas qui se présentent comportent des parties communes très importantes, qui sont mises à profit dans l'algorithme donné sur la figure III.12.

III-4.4. $f, zf, hf(m-1)$ variables parmi (d, b, yd, xb) et deux variables parmi (lr, qc, qb) sont connues.

Théoriquement, il existe à nouveau trois classes de combinaisons en ce qui concerne le groupe (d, b, yd, xb)

- D : $(yd_i \text{ ou } xb_i, i \neq in1)$ sont connus
 E : yd_{ic}, xb_{ic} et $(yd_i \text{ ou } xb_i, i \neq in1, i \neq ic)$ sont connus
 F : d et $(yd_i \text{ ou } xb_i, i \neq in1, i \neq in2)$ sont connus.

En fait, une étude des cas E et F montre que, si d et deux variables parmi lr, qb, qc sont connues et ont des valeurs arbitraires, il y a de très fortes chances pour que le problème n'ait pas de solution admissible, c'est-à-dire pour laquelle $0 \leq d \leq f$, $(0 \leq yd_i \leq 1, 0 \leq xb_i \leq 1,$

$i=1, m$). De plus ces deux cas ne présentent pratiquement aucun intérêt réel. Dans ces conditions, nous ne les retiendrons pas dans l'algorithme de la partie multiple.

Nous ne conservons que la classe D, qui est combinée, comme précédemment, avec trois cas possibles dépendant du choix des variables connues du groupe (lr, qc, qb) . Ces cas sont repérés dans l'algorithme par les lettres suivantes : δ si lr et qc sont connus, θ si ce sont lr et qb , et enfin w pour qc et qb .

Contrairement au cas précédent, les deux phases du calcul ne sont pas séparées. En effet le nombre de variables connues parmi (d, b, yd, xb) n'est pas suffisant pour permettre la détermination de toutes les variables dépendantes de ce groupe à partir des seules équations (1-21) et (1-22). Le calcul présente alors une itération globale fournissant la valeur de d . Si on dispose d'une première estimation de d , il se déroule de la façon suivante:

Classe D. (yd_i ou $xb_i, i \neq n$) sont connus.

1. Test : si δ aller en 2, si θ aller en 4, si w aller en 6
2. Effectuer le calcul comme dans le cas A. α . On détermine ainsi toutes les variables dépendantes, sauf d , plus une valeur calculée de qc
3. Test : qc calculé = qc désiré ? Oui : le calcul est terminé, non : aller en 8.
4. Effectuer le calcul comme dans le cas A. α . On détermine ainsi les variables dépendantes sauf d , plus que valeur calculée de qb .
5. Test : qb calculé = qb désiré ? Oui : le calcul est terminé, non : aller en 8.
6. Effectuer le calcul comme dans le cas A. β . On détermine ainsi les variables dépendantes sauf d , plus une valeur calculée de qb .
7. Test : qb calculé = qb désiré ? Oui : le calcul est terminé, non : continuer en 8.
8. Corriger la valeur de d à l'aide de la méthode de MULLER et reprendre le calcul en 1.

On remarque que le chemin de calcul obtenu utilise complètement le chemin du cas A, ce qui est intéressant pour la dimension de l'algorithme global.

III-4.5. f, zf, hf ($m-2$) variables parmi $(d, b, yd, xb), lr, qc$ et qb sont connus.

Ce cas, théoriquement possible, et qu'on pourrait résoudre, présente comme les cas E et F les deux caractères suivants :

- Son intérêt pratique est très faible
- Il y a un risque assez important que, pour des valeurs arbitraires de qc, qb , et lr il n'y ait pas de solution admissible.

Pour ces raisons nous n'avons pas non plus retenu ce cas dans l'algorithme de la figure III.12, qui dans ces conditions ne contient que les configurations utiles (décrites en III-4.3. et III-4.4.) apparaissant quand f, zf, hf font partie du vecteur d'entrée.

III-4.6. Une ou plusieurs variables parmi (f, zf, hf) ne sont pas connues.

III-4.6.a. f n'est pas connu.

Ce cas peut dériver d'un de ceux déjà envisagés par remplacement de la connaissance de f par celle d'une variable parmi d, lr, qc, qb, yd_i ou xb_i . Bien que le calcul soit possible dans tous les cas, seule la configuration où f est remplacé par d a quelques chances de se présenter pratiquement. Il suffit alors d'utiliser différemment l'équation (I-21) pour calculer f au lieu de d dans l'algorithme correspondant.

Pour ne pas surcharger l'algorithme de la figure III.12 nous n'y avons pas figuré ce cas, de même que les suivants, qui découlent très simplement des cas déjà représentés.

III-4.6.b. Des éléments de yf ne sont pas connus.

De même que pour f , le seul cas présentant un intérêt pratique est celui qui dérive d'un des cas précédents par remplacement de la connaissance de yf_i par yd_i ou xb_i . Il suffit alors d'employer différemment l'équation (I-22) dans l'algorithme correspondant.

III-4.6.c. hf n'est pas connu.

Ce cas dérive généralement d'un des précédents par remplacement de la connaissance de hf par celle de qc ou qb . L'équation (I-27) doit alors être employée différemment dans l'algorithme correspondant.

Remarque : Il convient de rappeler que les configurations non retenues dans cette partie ne sont pas exclues, mais sont réalisables par augmentation de la dimension du vecteur d'itération. En effet nous ne considérons les diverses configurations décrites que pour améliorer les performances de la méthode.

III-4.7. Existence et unicité des solutions. Sécurité de convergence des boucles d'itération.

Nous allons étudier successivement les divers points de calcul nécessitant une attention spéciale parce que pouvant conduire à des solutions non valables, ou à des impossibilités de résolution si on les aborde sans précaution.

III-4.7.a. Calcul de d dans le cas β .

Les équations (I-21) et (I-22) entraînent que, le débit étant compris entre les valeurs 0 et f , les concentrations doivent vérifier une de ces trois relations:

$$\left. \begin{array}{l} \text{ou} \quad yd_i < zf_i < xb_i \\ \text{ou} \quad yd_i > zf_i > xb_i \\ \text{ou} \quad yd_i = zf_i = xb_i \end{array} \right\} i = 1, m$$

Les données zf_{ic} , yd_{ic} , xb_{ic} des cas β doivent donc nécessairement obéir à cette condition. Remarquons de plus que le cas d'égalité de ces trois données entraînerait une indétermination sur d , et ne permettrait alors pas le calcul de cette variable.

Dans ces conditions les concentrations données zf_{ic} , yd_{ic} , xb_{ic} doivent donc satisfaire la relation suivante :

$$(III-37) \quad (zf_{ic} - yd_{ic})(zf_{ic} - xb_{ic}) < 0$$

III-4.7.b. Calcul des éléments Inconnus de yd , xb dans les cas A et B.

d et b étant positifs, pour que les concentrations calculées dans l'étape 2 de A et B soient positives, il faut, d'après l'équation (I-5), que l'une des deux relations suivantes soit vérifiée :

$$(III-38) \quad \left\{ \begin{array}{ll} yd_i \leq \frac{f \cdot zf_i}{d} & \text{si } yd_i \text{ est connu} \\ xb_i \leq \frac{f \cdot zf_i}{b} & \text{si } xb_i \text{ est connu} \end{array} \right.$$

De plus pour que les concentrations calculées dans l'étape 3 soient positives il faut, d'après les équations (III-35) et (III-36) que les deux relations suivantes soient vérifiées :

$$(III-39) \quad \sum_{i \neq in} yd_i \leq 1$$

$$(III-40) \quad \sum_{i \neq in} xb_i \leq 1$$

Une condition suffisante pour que l'une des deux conditions (III-38) soit satisfaite est de choisir comme concentration connue yd_i si l'indice i est relatif à un composant lourd, xb_i dans le cas contraire. La valeur de cette concentration connue (yd_i ou xb_i) est alors nécessairement inférieure à zf_i , ce qui satisfait nécessairement (III-38).

Des conditions nécessaires pour que les relations (III-39) et (III-40) soient satisfaites sont les suivantes :

$$(III-41) \quad \left\{ \begin{array}{ll} xb_i \geq \frac{f \cdot zf_i - d}{b} & \text{si } xb_i \text{ est connu} \\ yd_i \geq \frac{f \cdot zf_i - b}{d} & \text{si } yd_i \text{ est connu} \end{array} \right.$$

Ces conditions ne sont cependant pas suffisantes et il subsiste ainsi un risque, pour un jeu de données arbitraires, qu'il n'existe pas de solution satisfaisant (III-38), (III-39) et (III-40).

Remarquons que ce risque est d'autant plus grand qu'un des débits d ou b est plus faible, mais qu'il est sensiblement réduit si on choisit comme composant inconnu in celui qui apparaît en quantité la plus grande dans le débit faible.

L'expérience montre que ce choix est souvent suffisant pour que le calcul se déroule normalement. Si cependant les risques cités se matérialisent, la solution sûre consiste à utiliser le chemin C de l'algorithme de réduction et à inclure l'une des concentrations inconnues yd_{in} ou xb_{in} dans le vecteur d'itération et l'erreur sur d dans le vecteur d'erreur, augmentant ainsi la dimension de ceux-ci d'une unité.

III-4.7.c. Calcul de d et des (éléments inconnus de yd et xb) dans le cas C.

Comme précédemment les concentrations connues doivent satisfaire une des relations (III-38), et la condition nécessaire (connu $(yd_i, xb_i) < zf_i$) est toujours valable. Nous allons montrer maintenant qu'elle est également suffisante pour qu'il existe une valeur de d comprise entre 0 et f qui annule la fonction ϕ d'erreur du calcul itératif de d :

$$\phi(d) = \sum_{i=1}^m yd_i - 1$$

Supposons que cette condition soit remplie et qu'on ait rangé les constituants de façon que

$$(III-42) \quad \begin{aligned} yd_i &> zf_i & i=1, ilr \\ yd_i &< zf_i & i = ild, m \quad \text{avec } ild = ilr + 1 \end{aligned}$$

Les concentrations connues sont alors $(xb_i, i=1, ilr)$, $(yd_i, i=ild, m)$.

L'expression de la fonction ϕ est alors la suivante :

$$\phi(d) = \sum_{i=1}^{ilr} \frac{zf_i - bxb_i}{d} + \sum_{i=ild}^m yd_i - 1$$

ou encore

$$\phi(d) = \sum_{i=1}^{ilr} \left[\frac{f}{d} (zf_i - xb_i) + xb_i + \sum_{i=ild}^m \right] yd_i - 1$$

où toutes les variables du second membre sont connues.

Calculons la valeur de ϕ quand d tend vers les valeurs extrêmes 0 et f .

Si d tend vers 0 par valeurs positives

$$\phi(d) \approx \sum_{i=1}^{ilr} \frac{f}{d} (zf_i - xb_i)$$

D'après (III-42), tous les termes de cette somme sont nécessairement positifs et tendent vers $+\infty$ d'où

$$\begin{cases} \phi(d) \rightarrow +\infty \\ d \rightarrow 0 \end{cases}$$

Si au contraire $d=f$, on obtient

$$\phi(f) = \sum_{i=1}^{ilr} zf_i + \sum_{i=ild}^m yd_i - 1$$

or d'après la même condition $yd_i < zf_i$ pour $i=ild, m$

$$\text{d'où } \sum_{i=1}^{ilr} zf_i + \sum_{i=ild}^m yd_i < \sum_{i=1}^m zf_i = 1$$

d'où la relation

$$\phi(f) < 0$$

La fonction ϕ étant continue dans l'intervalle $]0, f]$, il existe nécessairement, dans cet intervalle, une valeur de d telle que $\phi(d) = 0$. La fonction $\phi(d)$ est de plus monotone pour $d > 0$, la solution est donc unique.

Ces propriétés suffisent aussi pour assurer la convergence de la méthode de MULLER.

III-4.7.d. Calcul de lr dans les cas β, γ, ω .

Nous avons vu que le calcul de lr dans les cas β, γ, ω est inclus dans un calcul normal du plateau 2. Nous avons déjà étudié les propriétés de l'algorithme de calcul d'un plateau j (paragraphe III-3.1.c.), et montré la fiabilité absolue du calcul de l_{j-1} .

III-4.7.e. Calcul de d dans le cas D.

La relation (I-27) donne la fonction d'erreur :

$$\phi(d) = f \cdot (hf - hlb) + qc + qb - d (hvd - hlb)$$

Si on néglige en première approximation les variations des enthalpies on voit que cette fonction est monotone, ce qui entraîne la convergence de la méthode de MULLER si la solution existe. Cependant la valeur d solution de l'équation $\phi(d) = 0$ est soumise à des contraintes : d doit être compris dans le domaine $[0, f]$. De plus il existe des restrictions dans ce domaine, dues au fait que toutes les concentrations calculées yd_i et xb_i doivent être positives.

Ceci entraîne que la solution n'existe que si on dispose d'un jeu de valeurs cohérentes des variables indépendantes, notamment en ce qui concerne qc, qb et lr . En effet, un couple de valeurs quelconques choisi pour deux de ces variables ne correspond pas forcément à un état possible de la colonne.

Remarquons que ceci ne constitue pas une faiblesse de l'algorithme proposé, mais est une condition qu'on doit évidemment respecter quelle que soit la méthode de calcul employée.

III-4.8. Transformation des variables yd, xb .

Nous avons donné en III-4.7.b et III-4.7.c un critère de choix des éléments connus de yd, xb : choisir, pour i , celui de yd_i et xb_i qui est inférieur à zf_i . Si le choix est effectué de cette façon, il suffit alors que les éléments yd_i et xb_i du vecteur d'entrée soient inférieurs à zf_i .

Cette condition est très facile à remplir quand ils font partie du vecteur indépendant, mais il est difficile d'être assuré qu'elle soit vérifiée quand ces éléments font partie du vecteur d'itération, et sont ainsi des résultats du calcul de convergence. Dans ces conditions il est intéressant de mettre en oeuvre un changement de variable destiné à pallier à cet inconvénient dans tous les cas.

Soit yd_i^* la variable transformée de yd_i , définie de la façon suivante :

$$(111-43) \quad yd_i^* = \text{Log} \left[\frac{yd_i / \eta \cdot zf_i}{1 - yd_i / \eta \cdot zf_i} \right]$$

et supposons tout d'abord que $\eta = 1$

On constate aisément que yd_i^* tend respectivement vers $-\infty$ et $+\infty$ quand yd_i tend vers 0 par valeurs positives et vers zf_i par valeurs inférieures. De plus la fonction donnant yd_i^* à partir de yd_i est définie, continue et biunivoque dans tout l'intervalle $]0, zf_i[$. Enfin il est aisé de tirer l'expression de la fonction inverse :

$$(111-44) \quad yd_i = \exp \left[\frac{yd_i^*}{1 - \exp(yd_i^*)} \right] \cdot \eta \cdot zf_i$$

Ainsi à toute valeur finie de yd_i^* correspond une valeur unique de yd_i strictement positive et strictement inférieure à zf_i . Le coefficient η est introduit pour éviter que, du fait de l'imprécision des calculs, on puisse obtenir $yd_i = zf_i$ comme résultat correspondant à une valeur assez grande de yd_i^* , ce qui pourrait être gênant dans le cas C précédemment défini. On choisit alors une valeur de η inférieure à 1 d'une quantité juste suffisante pour éviter cette ennui.

Dans ces conditions c'est la variable transformée, yd_i^* (ou xb_i^*) qui est utilisée, dans tous les calculs extérieurs à l'algorithme de réduction, pour définir le composant i , variable dont la valeur n'est pas limitée. yd_i n'est alors recalculée qu'à l'entrée de l'algorithme de réduction, et sa valeur est nécessairement comprise dans l'intervalle $]0, zf_i[$

III-4.9. Vecteur d'itération.

Nous venons de définir un algorithme de réduction comportant divers vecteurs d'entrée possibles. Nous avons déjà décrit (paragraphe III-1.3.c) comment est constitué le vecteur d'itération dans ce cas : il est formé des éléments du vecteur d'entrée s_i choisi qui ne font pas partie dans le vecteur indépendant. Le vecteur d'entrée s_i choisi est celui ayant la plus grande partie commune avec le vecteur a . Nous pouvons maintenant préciser la dimension num du vecteur u dans le cas d'une réalisation minimale. La dimension ns du vecteur d'entrée est (paragraphe III-4.1.a) $ns = 2m + 3 + ne$. Celle na du vecteur des variables indépendantes est (paragraphe I-5) : $na = m + 4 + ne$ d'où la dimension minimale du vecteur d'itération :

$$num = m-1$$

On vérifie que cette valeur correspond bien à celle obtenue pour la dimension de la partie fondamentale du vecteur d'erreur (paragraphe III-3.5.)

III-5. EXTENSION AU CAS DES COLONNES COMPLEXES.

III-5.1. Structure envisagée.

Nous entendons par colonne complexe une colonne pour laquelle chaque plateau, en plus des flux circulant dans la colonne classique, peut comporter une alimentation arrivant dans un état quelconque, des soutirages en phase vapeur et en phase liquide, un apport de chaleur (positif ou négatif).

Dans ce qui suit nous ne faisons aucune restriction sur le nombre de plateaux complexes que peut comporter la colonne. La structure de celle-ci est alors très générale et peut représenter la majorité des colonnes ou groupes de colonnes existants.

III-5.2. Calcul d'un plateau complexe.

Pour décrire un tel plateau, il est nécessaire de mettre en oeuvre les notations supplémentaires portées sur la figure III.1.2. et qui sont une généralisation de celles du paragraphe I-2.

En effectuant les bilans matériels et enthalpiques du la section supérieure limitée par les pointillés on obtient les relations suivantes :

$$(III-45) \quad \sum_{n=1}^{j-1} f_n + vm_j = \sum_{n=1}^{j-1} (sl_n + sv_n) + l_{j-1}$$

$$(III-46) \quad \sum_{n=1}^{j-1} f_n \cdot zf_n + vm_j \cdot ym_j = \sum_{n=1}^{j-1} (sl_n \cdot x_n + sv_n \cdot ym_n) + l_{j-1} \cdot x_{j-1}$$

$$(III-47) \quad \sum_{n=1}^{j-1} (f_n \cdot hf_n + q_n) + vm_j \cdot ym_j = \sum_{n=1}^{j-1} (sl_n \cdot hl_n + sv_n \cdot hvm_n) + l_{j-1} \cdot hl_{j-1}$$

avec

$$(III-48) \quad vm_j + sv_j = v_j + fv_j$$

$$(III-49) \quad (vm_j + sv_j) ym_j = v_j \cdot y_j + fv_j \cdot yf_j$$

$$(III-50) \quad (vm_j + sv_j) hvm_j = v_j \cdot hv_j + fv_j \cdot hvf_j$$

Les équations décrivant le bilan d'une section inférieure limitée au plateau j sont analogues. Les équations (I-48) à (I-64) sont applicables au calcul de l'état de l'alimentation de chaque plateau. Les autres équations du chapitre I-4 sont applicables sans modification.

Le calcul d'un plateau j est effectué de la même façon que dans les algorithmes des paragraphes III-3.1.a et III-3.1.b, par itération sur l_{j-1} ou sur v_{j+1} , en employant les équations (III-45) à (III-50) ou leurs homologues.

III-5.3. Vecteur indépendant, vecteur d'itération, vecteur d'erreur.

L'introduction d'une alimentation supplémentaire nécessite la connaissance de $(m+1)$ variables indépendantes supplémentaires, celle d'un soutirage latéral ou celle d'un apport de chaleur une variable. Nous supposons tout d'abord que le débit, la composition et l'enthalpie

(ou la température) de chaque alimentation font partie des variables indépendantes, de même le débit de tous les soutirages moins un, et la puissance calorifique de tous les apports de chaleur moins un.

Dans les calculs relatifs à la colonne conventionnelle, nous avons utilisé la possibilité de résoudre directement les bilans massiques et enthalpiques de la colonne complète pour réduire la dimension du vecteur d'itération. Dans le cas d'une colonne complexe ne comportant pas de soutirage latéral, cette propriété est conservée, et la constitution du vecteur d'itération est identique à celle du cas de la colonne conventionnelle.

Dans le cas où des soutirages latéraux existent, il est toujours possible d'effectuer le bilan massique global, mais plus d'utiliser directement les équations de bilan par composant, au nombre de $m-1$, et l'équation de bilan enthalpique de la colonne complète. Dans ces conditions le vecteur d'entrée le vecteur d'itération et le vecteur d'erreur comportent m variables supplémentaires par rapport au cas précédent. Les variables supplémentaires du vecteur d'erreur, qui sont incluses dans la partie fondamentale, représentent l'erreur sur les m équations non utilisées. Le vecteur d'entrée présente alors seulement deux options possibles, la connaissance de l_r pouvant remplacer celle de q_1 .

L'algorithme proposé conserve ainsi ses propriétés dans le cas d'une colonne complexe, est d'une formulation plus simple, qu'on peut d'ailleurs employer aussi pour les colonnes conventionnelles, mais qui conduit à une augmentation de la dimension du vecteur d'itération égale au nombre m de composants.

III-6. CONCLUSIONS SUR L'ALGORITHME DE REDUCTION.

Il est aisé tout d'abord de vérifier que l'algorithme de réduction correspond à la structure et aux critères définis dans le chapitre III-1 : Il comporte une partie commune principale, consommant la majeure partie du temps de calcul, et un ensemble de configuration d'entrée correspondant à des cas usuels. Les temps de calcul des cas A, B, et C sont voisins ; celui du cas D est sensiblement plus long, mais la différence représente une part très faible du temps de calcul total (moins de 5 pour cent). De plus l'augmentation du volume de

programme par rapport au cas d'un algorithme fixe est très modérée. En effet, l'algorithme comporte de nombreuses ramifications, mais les phases de calcul principales de la partie multiple sont communes à toutes les entrées.

Examinons maintenant les propriétés d'ensemble de cet algorithme. Nous avons montré, à chaque pas du calcul, l'existence et l'unicité de la solution, sous réserve de disposer d'un jeu de variables indépendantes cohérent en ce qui concerne le cas D (paragraphe III-4.4) ainsi que la sécurité de convergence des procédures itératives employées. Dans ces conditions, l'algorithme de réduction proposé se présente ainsi comme un outil d'une grande fiabilité.

Notons de plus une propriété intéressante : même si le vecteur d'itération diffère de la solution, les valeurs calculées correspondent toujours à des états physiquement possibles pour les deux sections de colonne envisagées, c'est-à-dire qu'il existe nécessairement un état stable de la colonne pour lequel l'état de la section supérieure par exemple est identique à l'état actuellement calculé (et de même pour la section inférieure). C'est d'ailleurs ce qui entraîne l'existence et l'unicité de la solution tant qu'on reste dans le domaine de validité des modèles thermodynamiques.

On en déduit aussi que lorsqu'une solution du système d'équations formant le modèle est obtenue en utilisant l'algorithme de réduction décrit ($w=0$) elle correspond nécessairement à un état physique réel. Ceci est très important car, en effet, il n'existe pas de cas, à notre connaissance, où une colonne puisse avoir deux états d'équilibre distincts correspondant à un même jeu de variables indépendantes.

Ceci entraîne que la solution obtenue par utilisation de l'algorithme de réduction proposé (et d'une méthode de convergence) est unique et correspond à l'état physique réel de la colonne.

Résolution d'un système non-linéaire de
grande dimension.

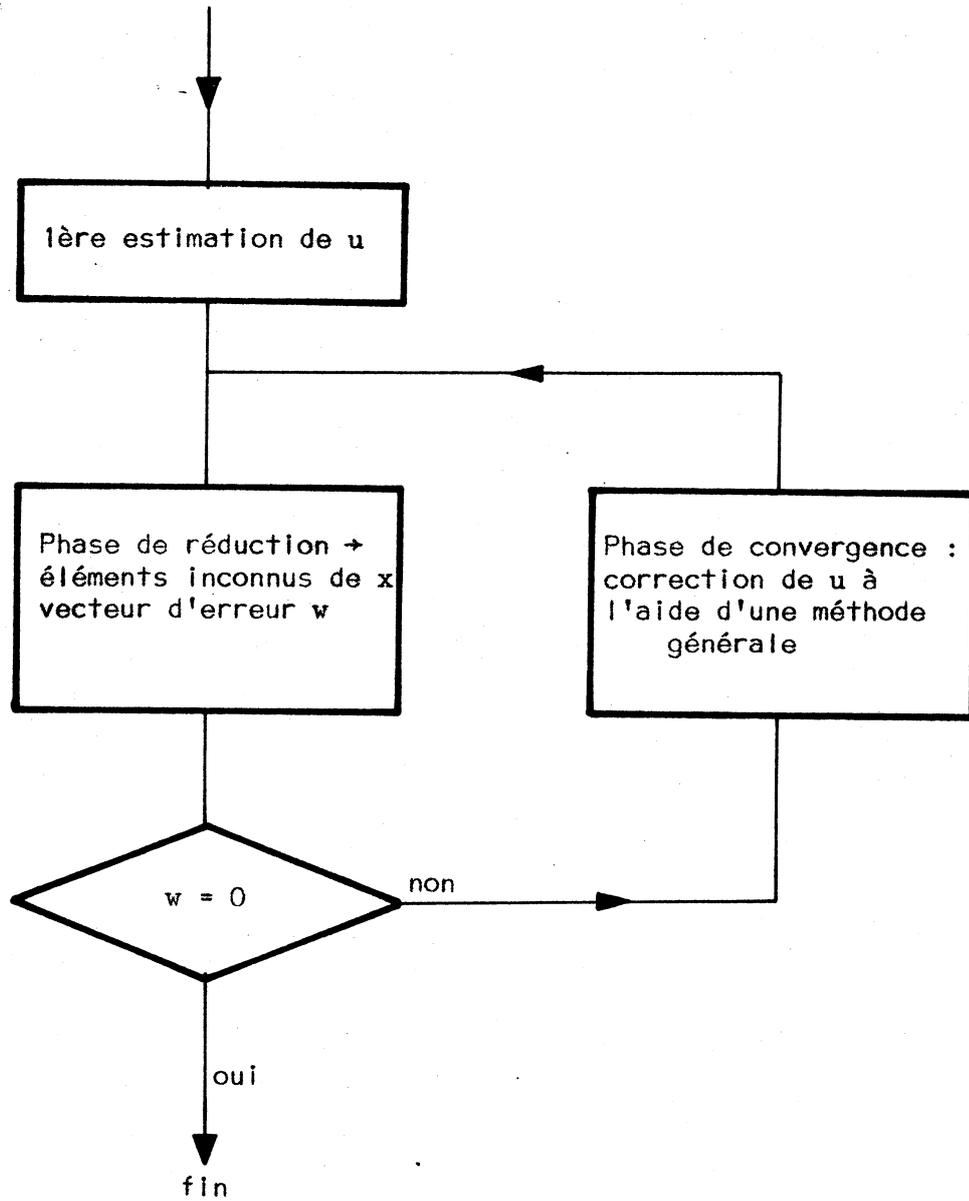


Figure III.1

Constitution des vecteurs a, s, u, w

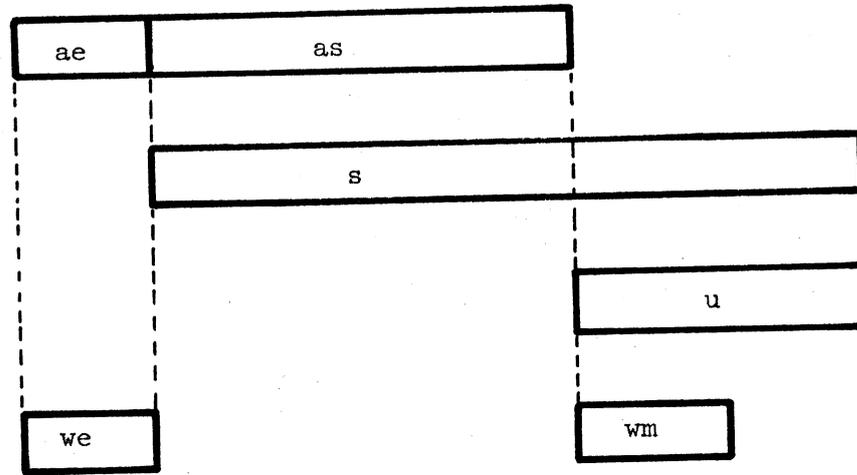


Figure III.2

Algorithme fixe de réduction

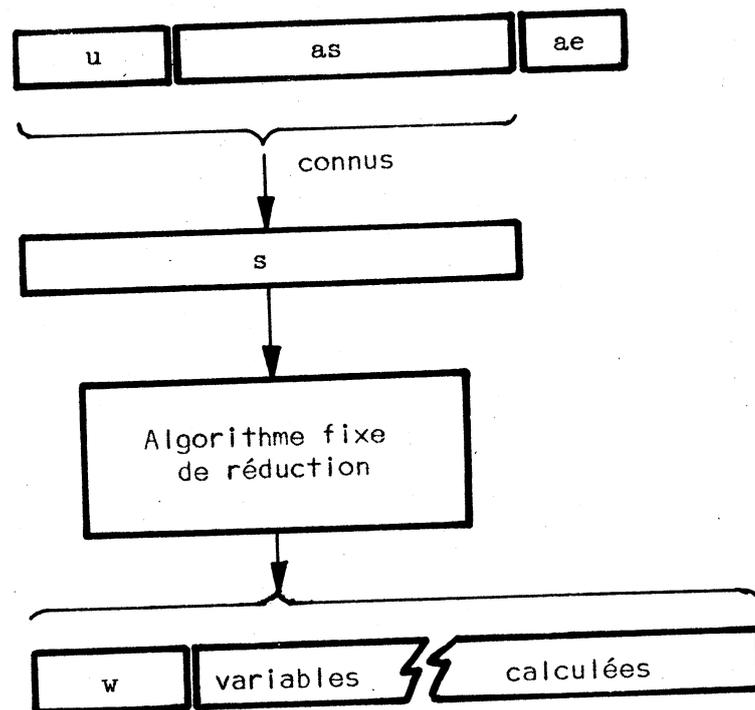


Figure III.3

Algorithme de réduction à plusieurs entrées

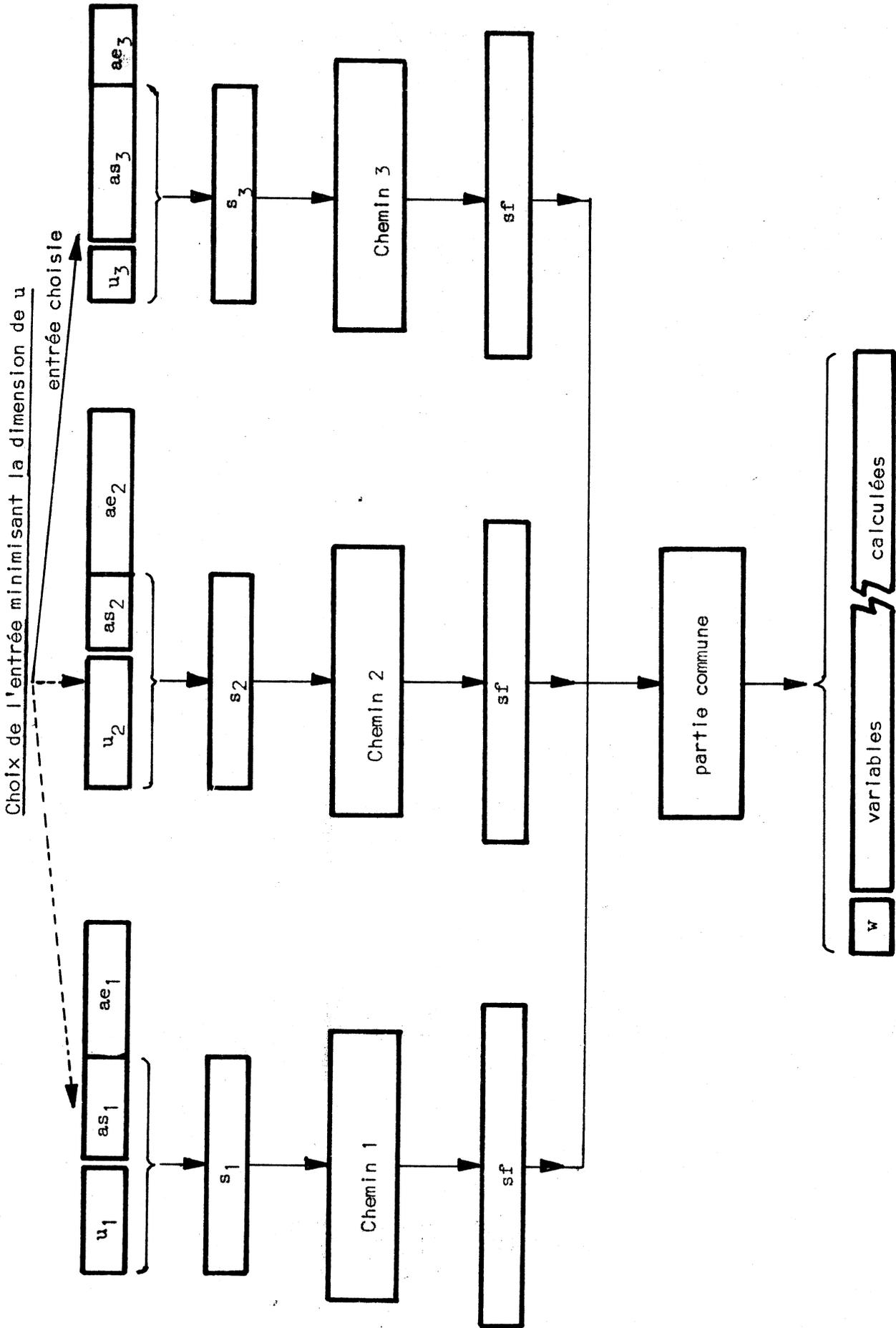


Figure III.4

Algorithme de calcul d'un point d'ébullition d'un
mélange en phase liquide .

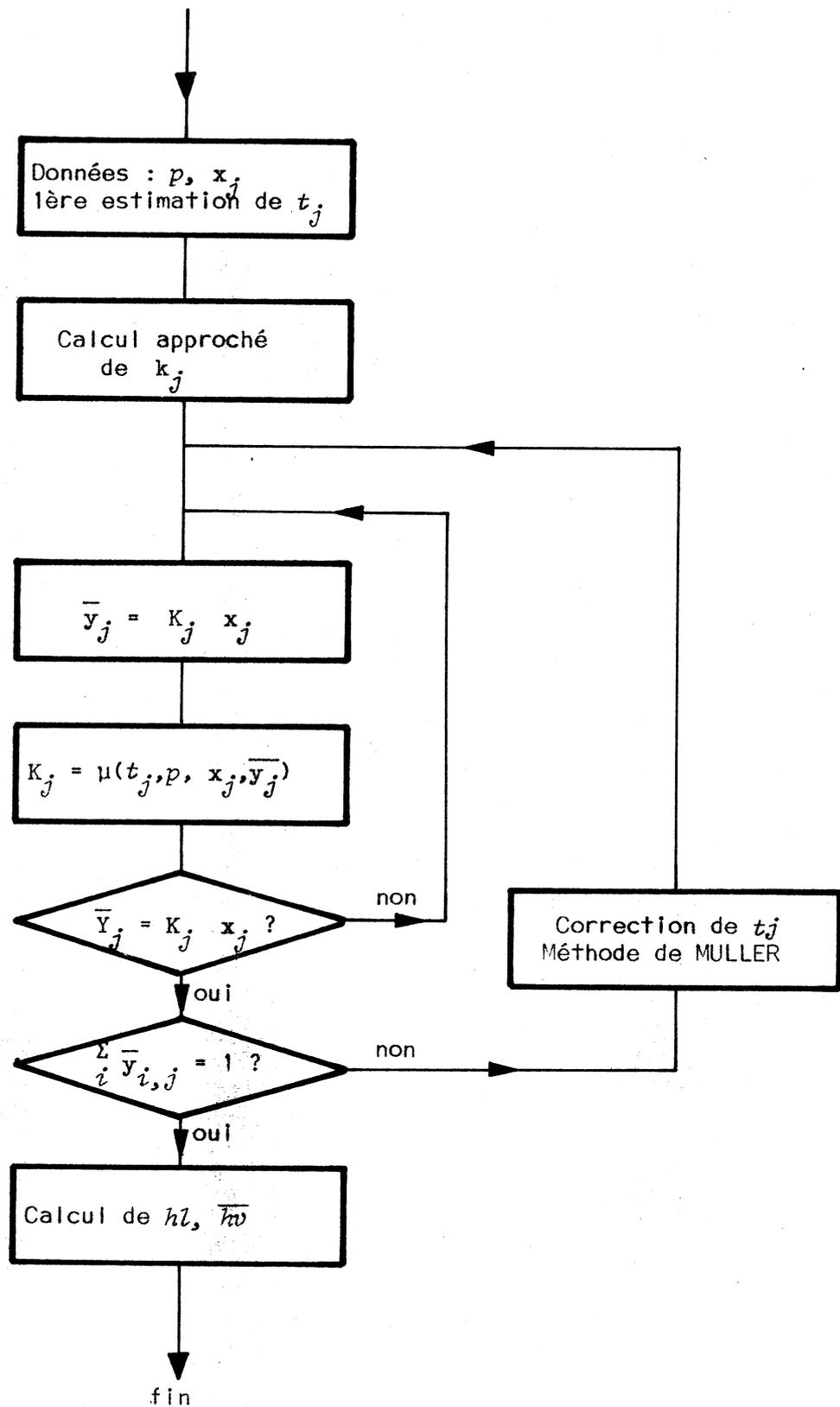


Figure III.5.a

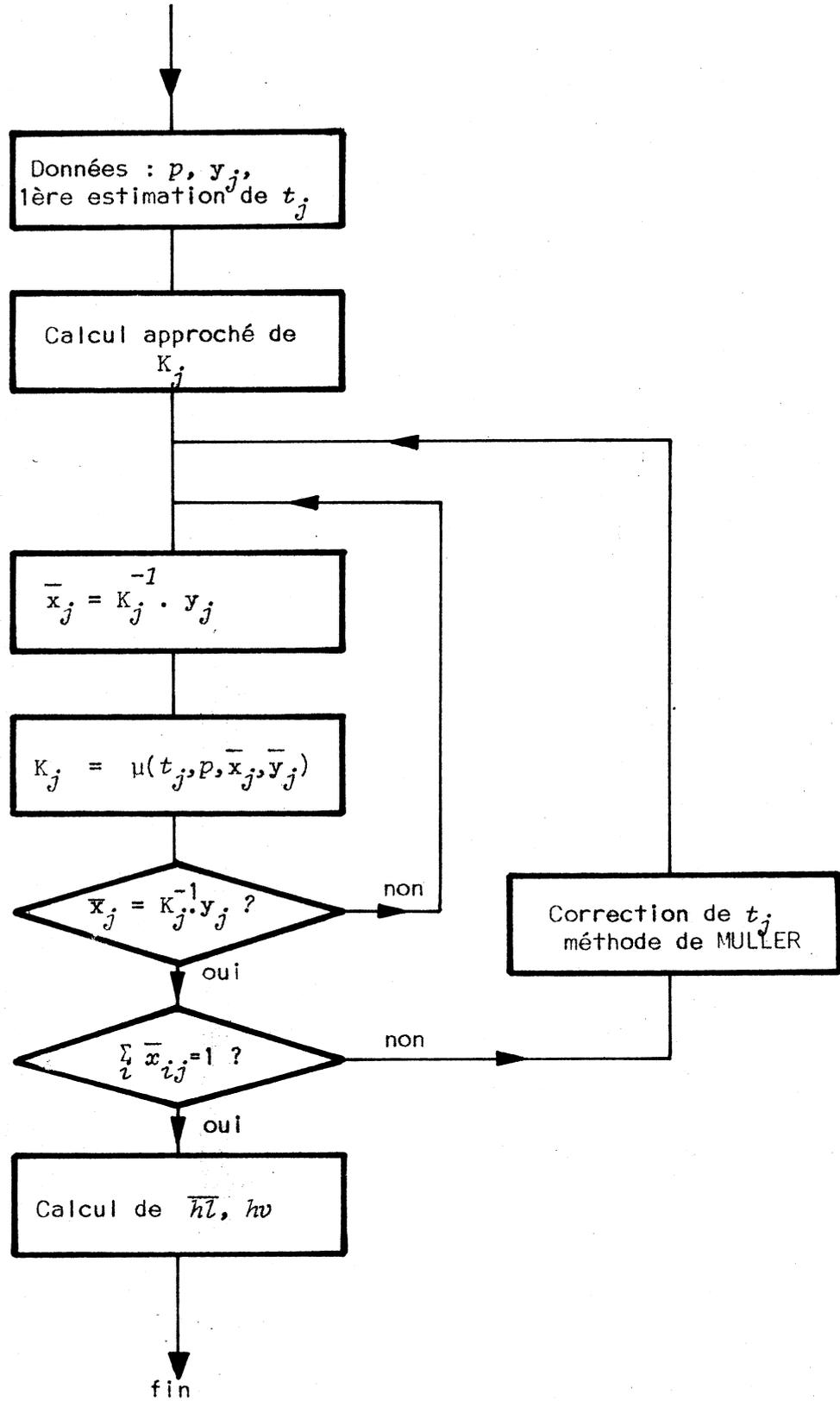


Figure III.5.b

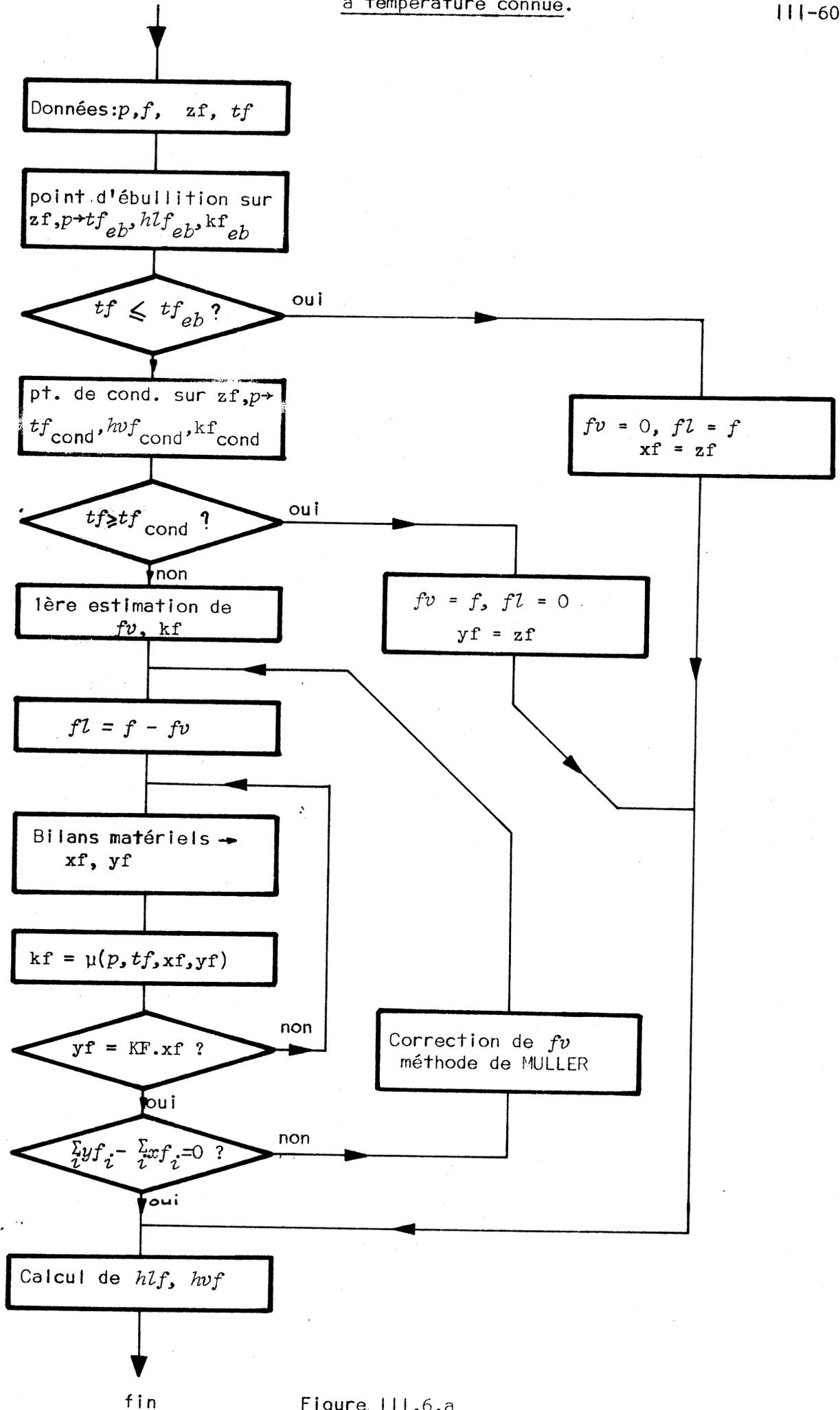


Figure III.6.a

Algorithme de calcul de l'état d'un mélange
à enthalpie connue.

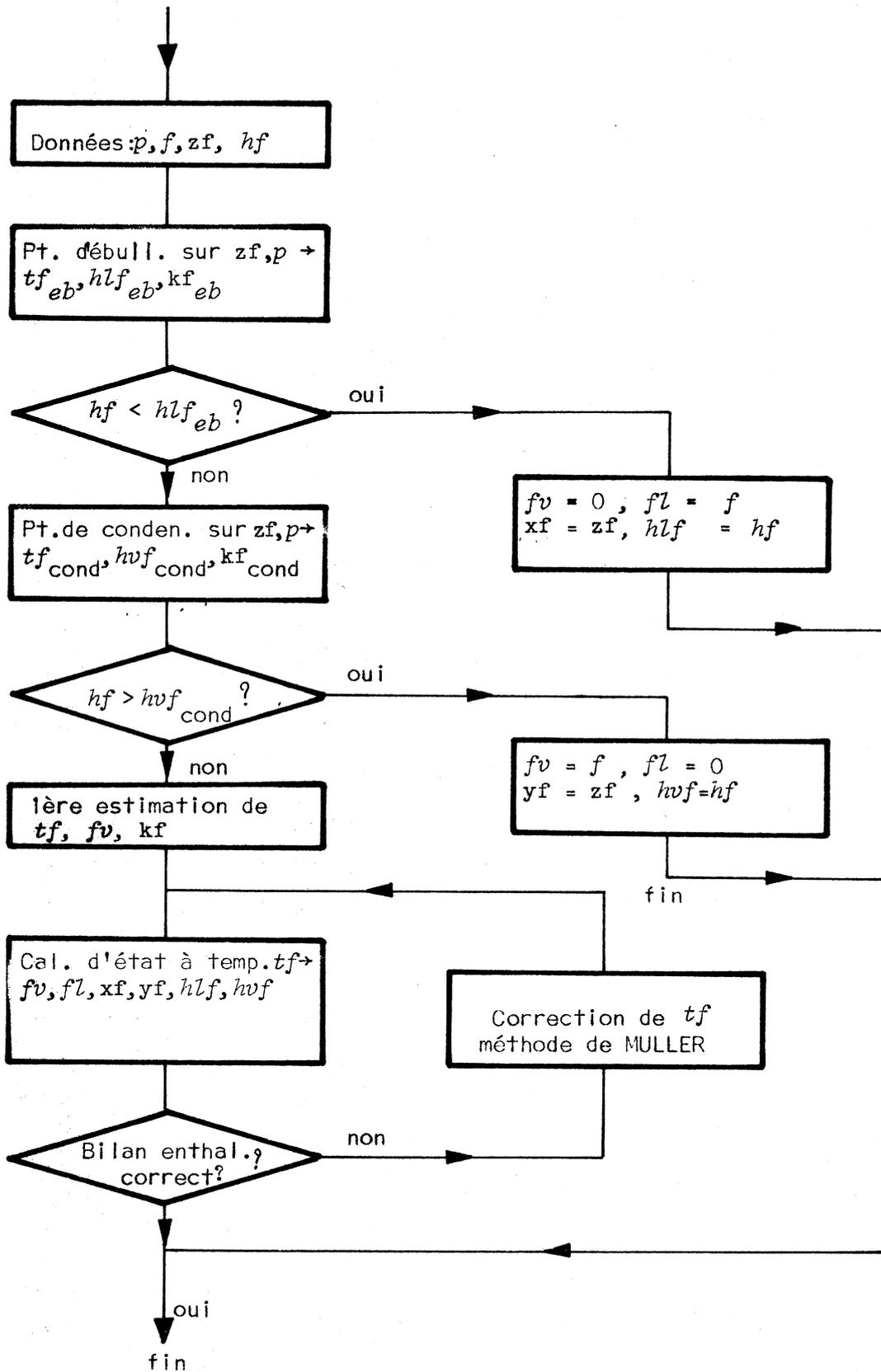


Figure III.6.b

Algorithme de calcul accéléré d'un point d'ébullition.

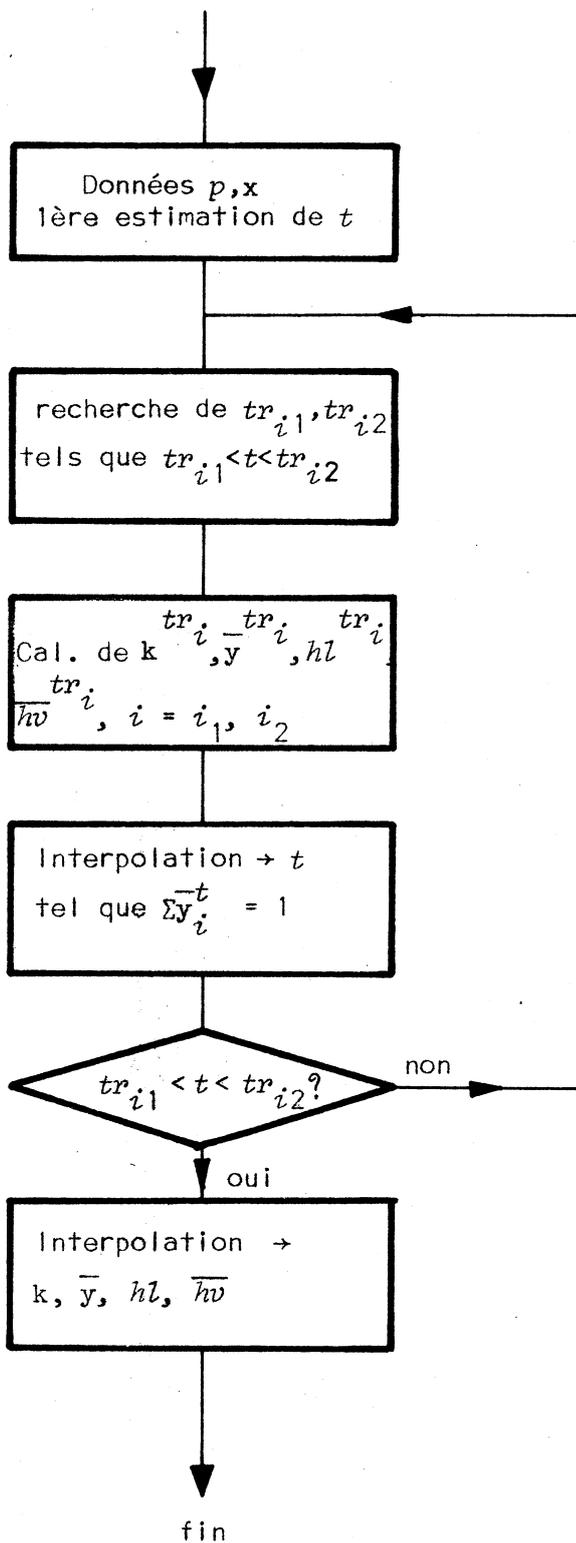


Figure III-7.a.

Algorithme de calcul accéléré d'un point de condensation.

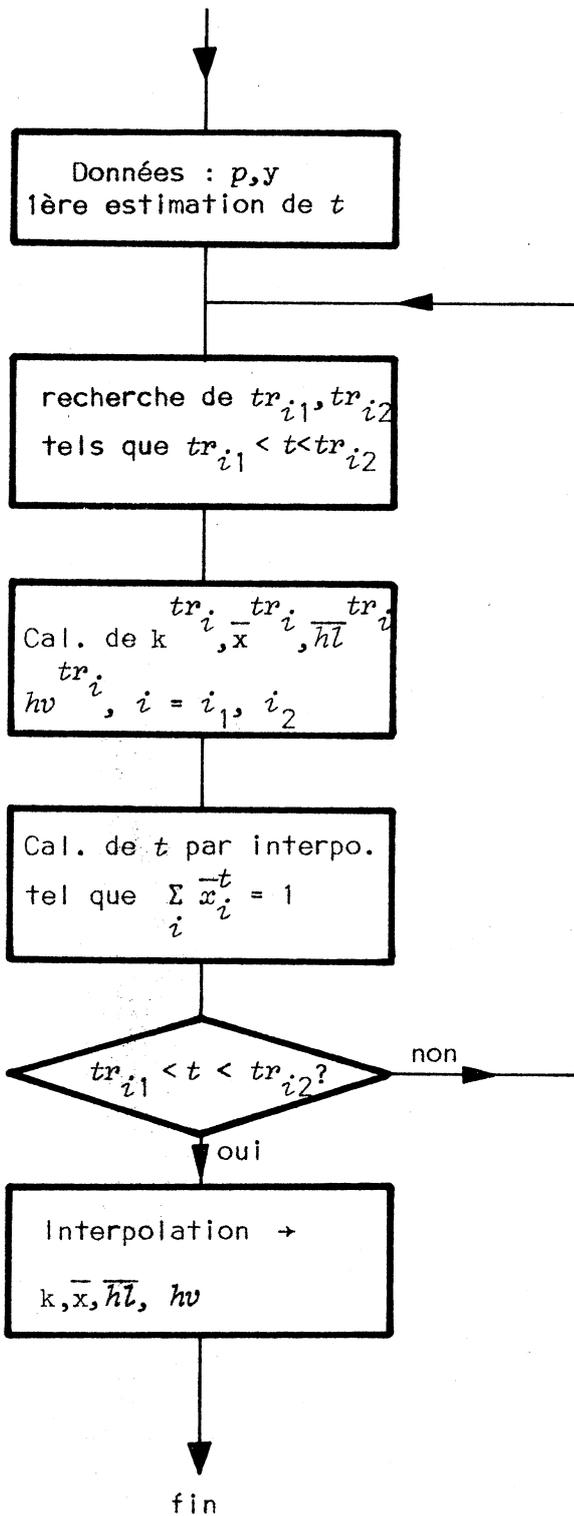


Figure III.7.b.

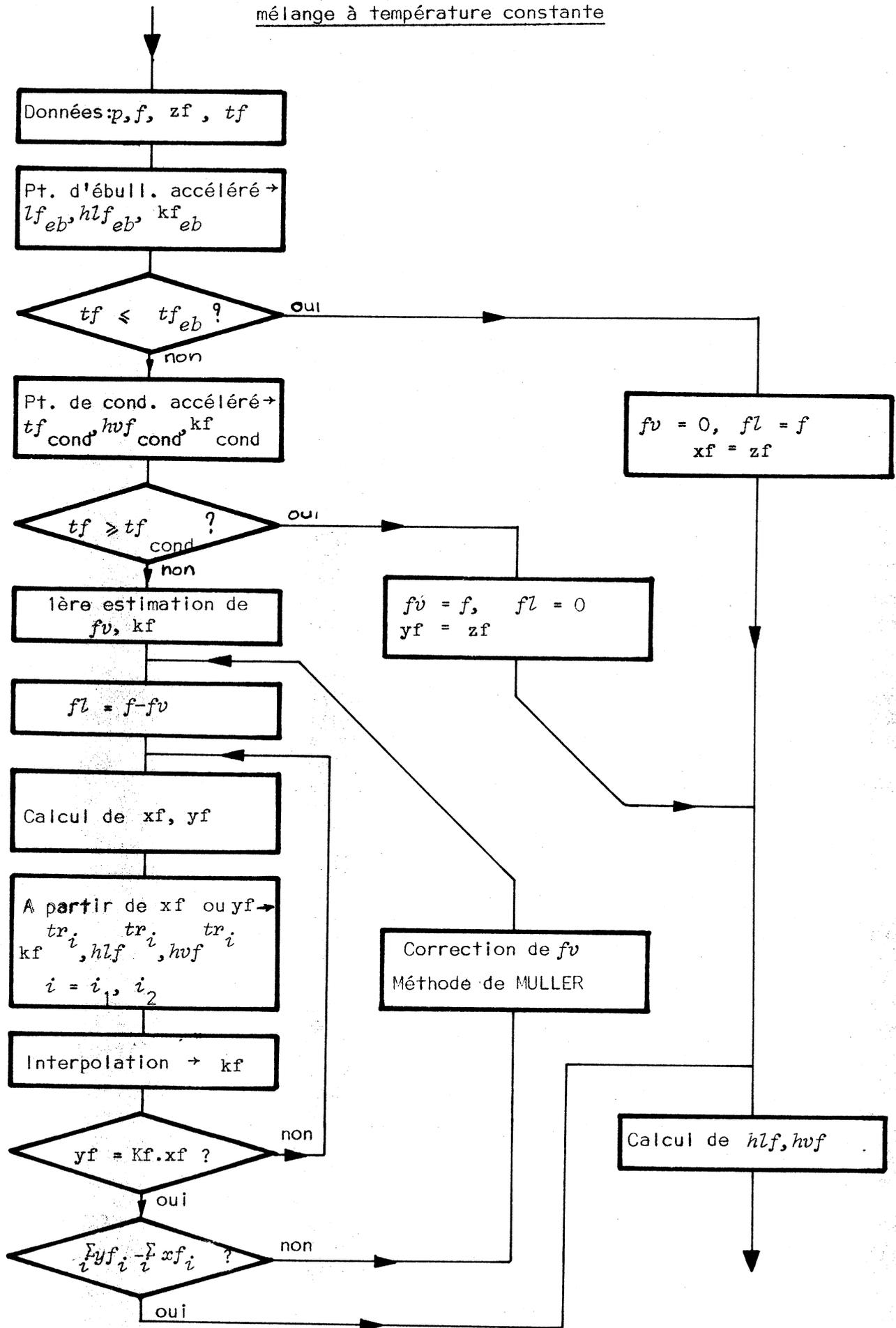


Figure III.8

Algorithme de calcul du plateau j de la section supérieure

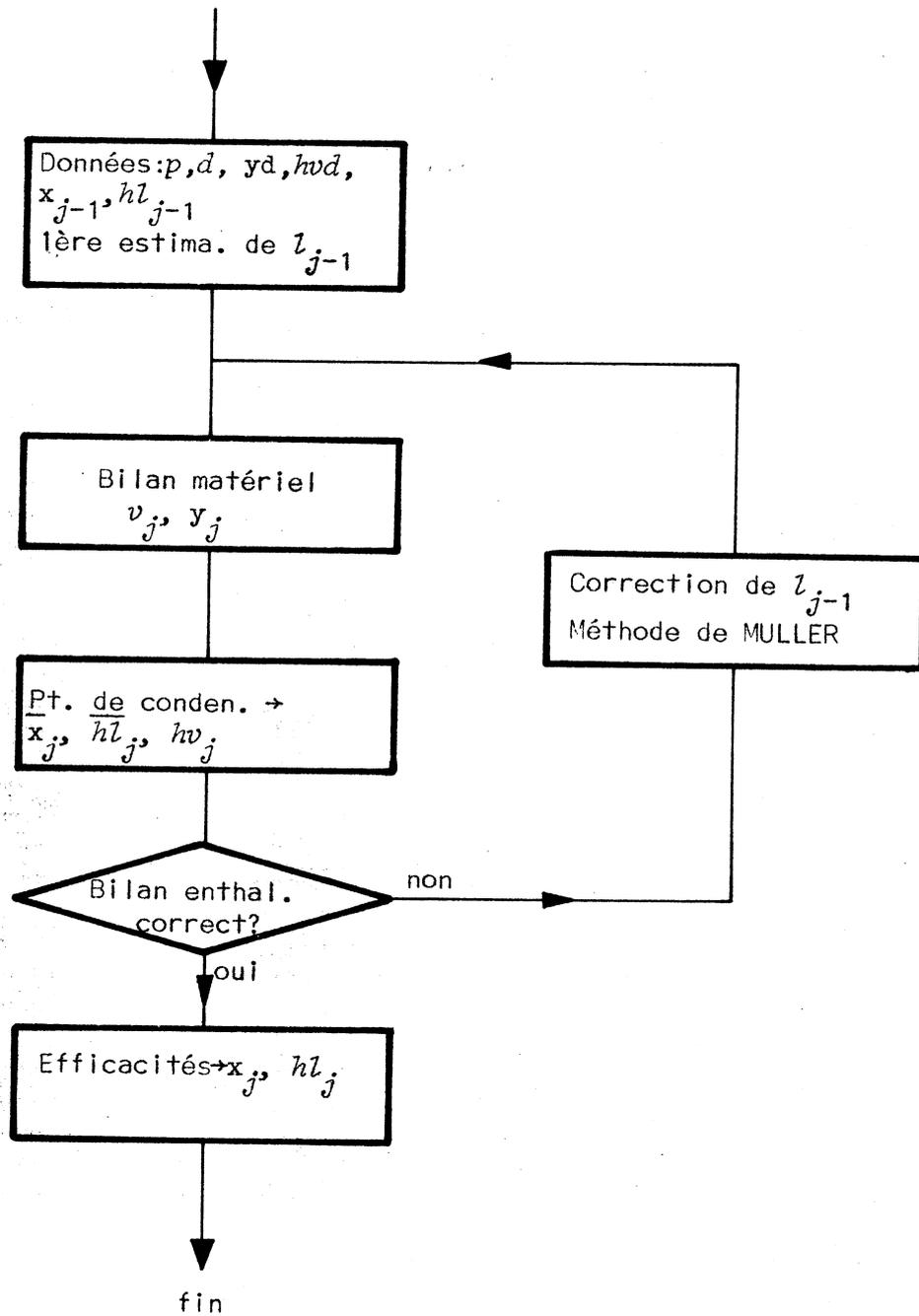


Figure III.9.a.

Algorithme de calcul du plateau j de la section inférieure.

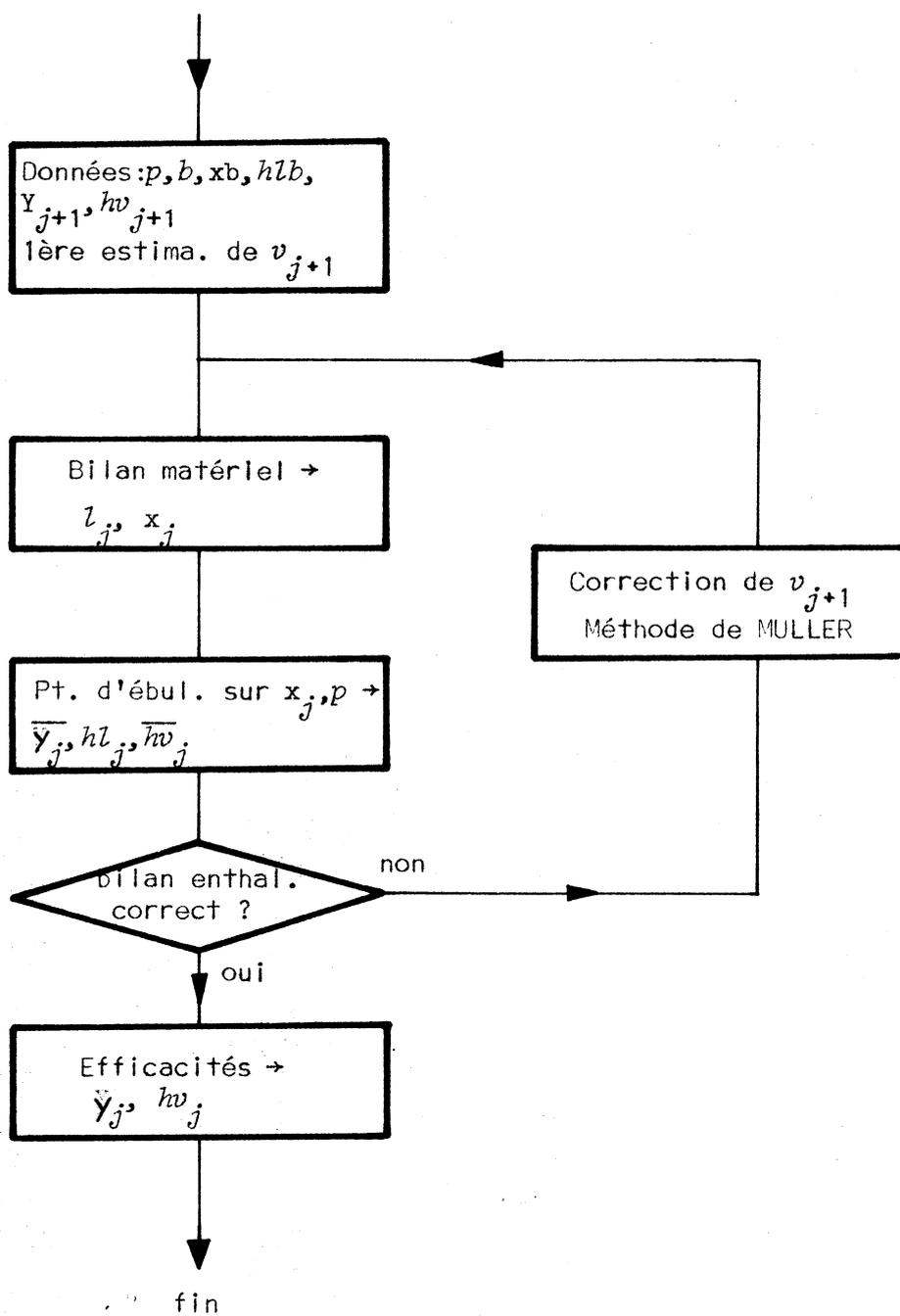


Figure III.9.b.

Algorithme de calcul de la section
supérieure.

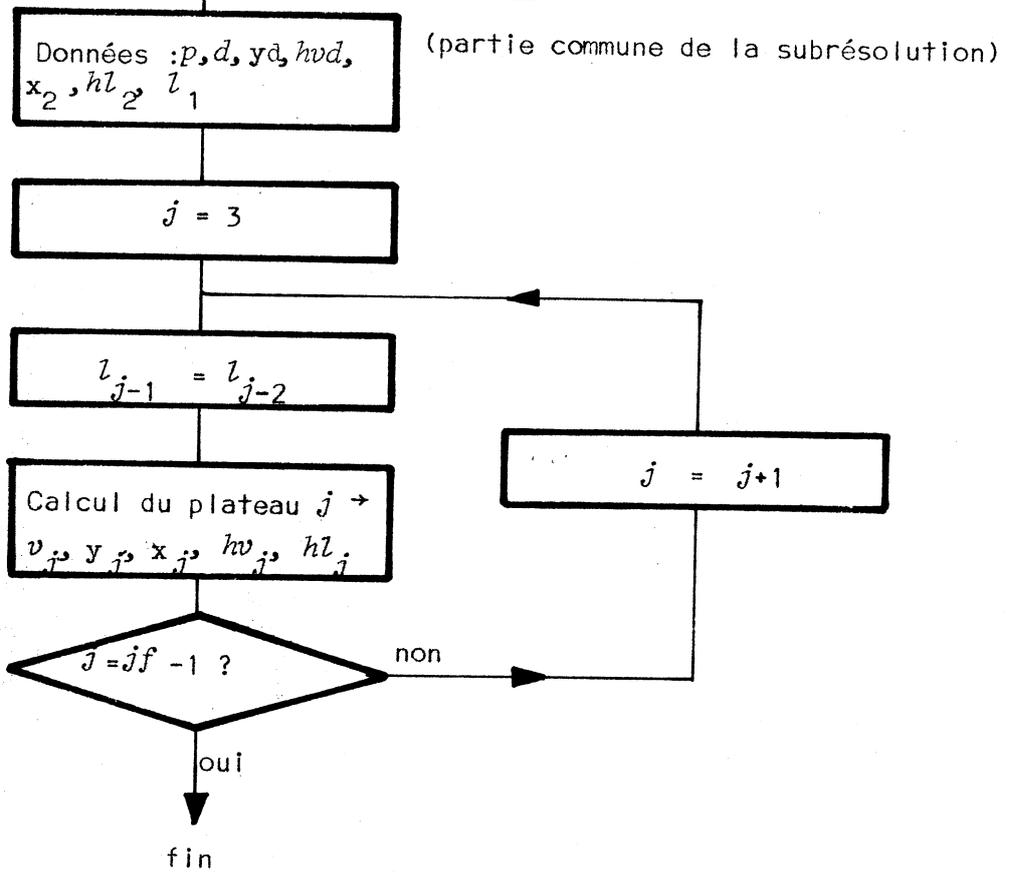


Figure III.10.a

Algorithme de calcul de la section
inférieure. (partie commune).

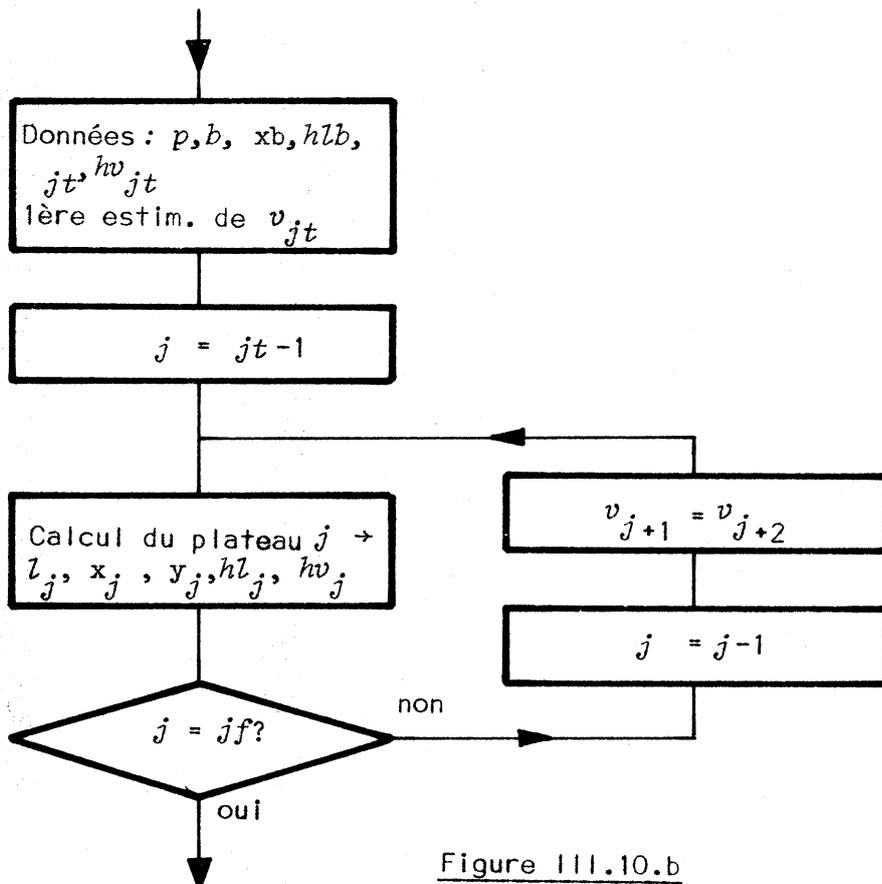


Figure III.10.b

Algorithme de calcul de $ysfd$
(plateau d'alimentation)

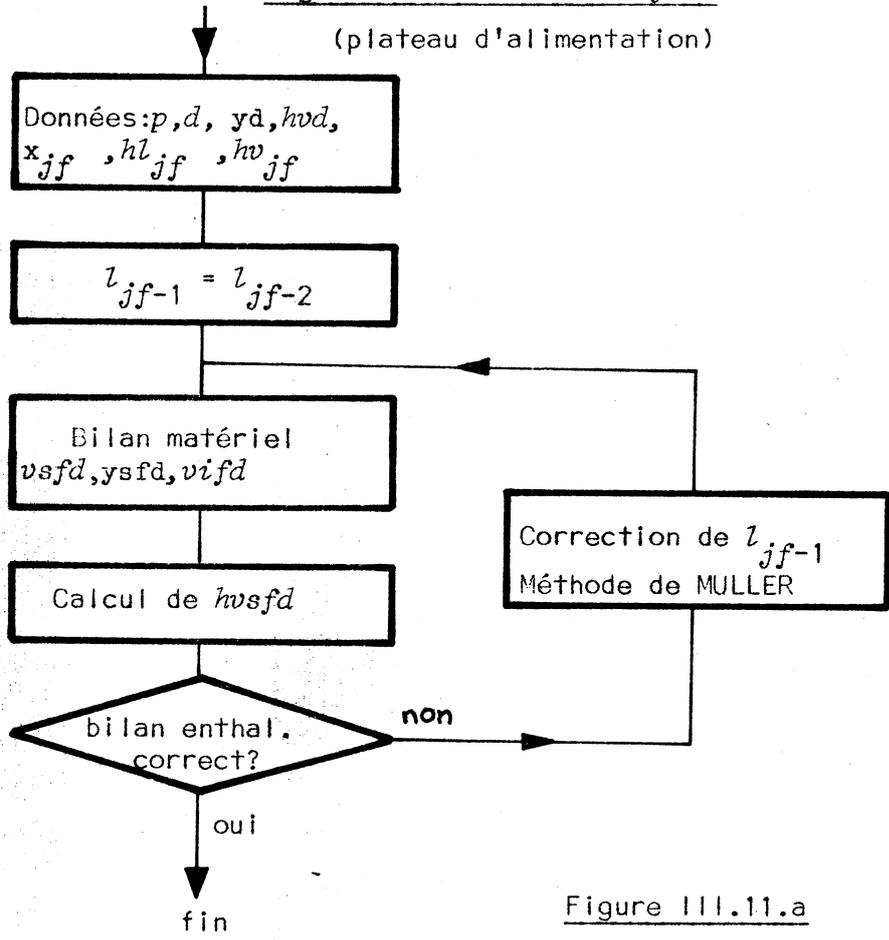


Figure III.11.a

Algorithme de calcul de $ysfb$
(plateau d'alimentation)

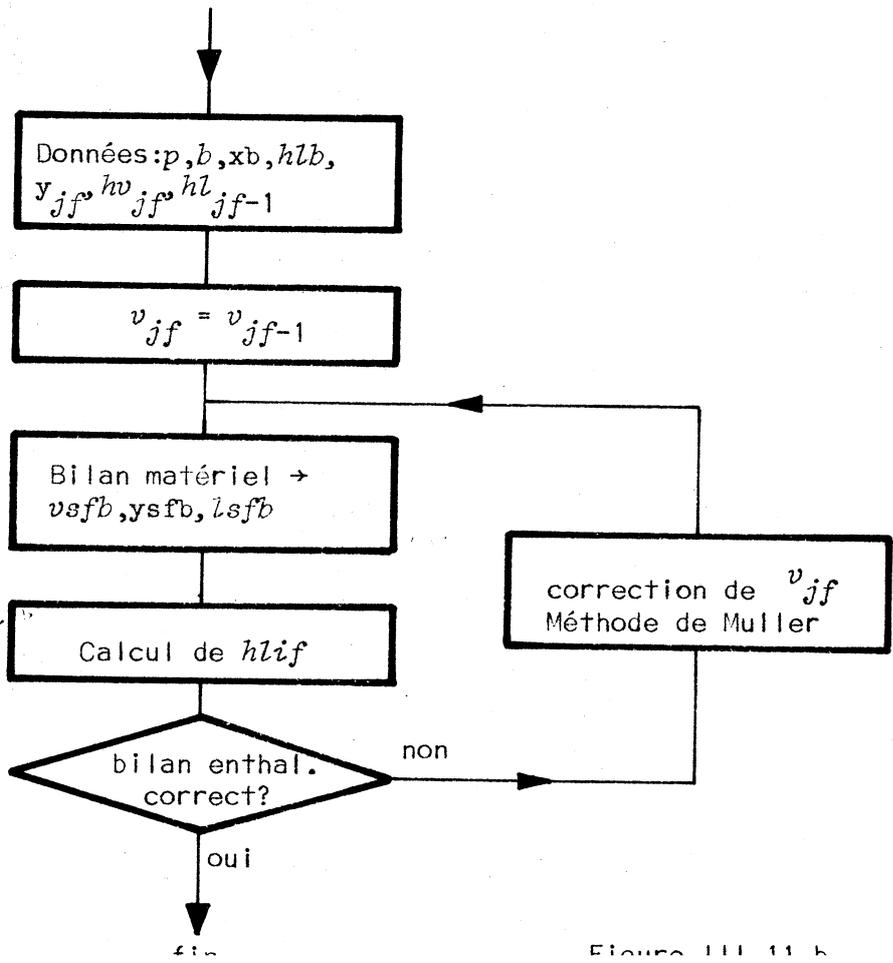


Figure III.11.b

Algorithme de calcul de la partie multiple de la subrésolution.

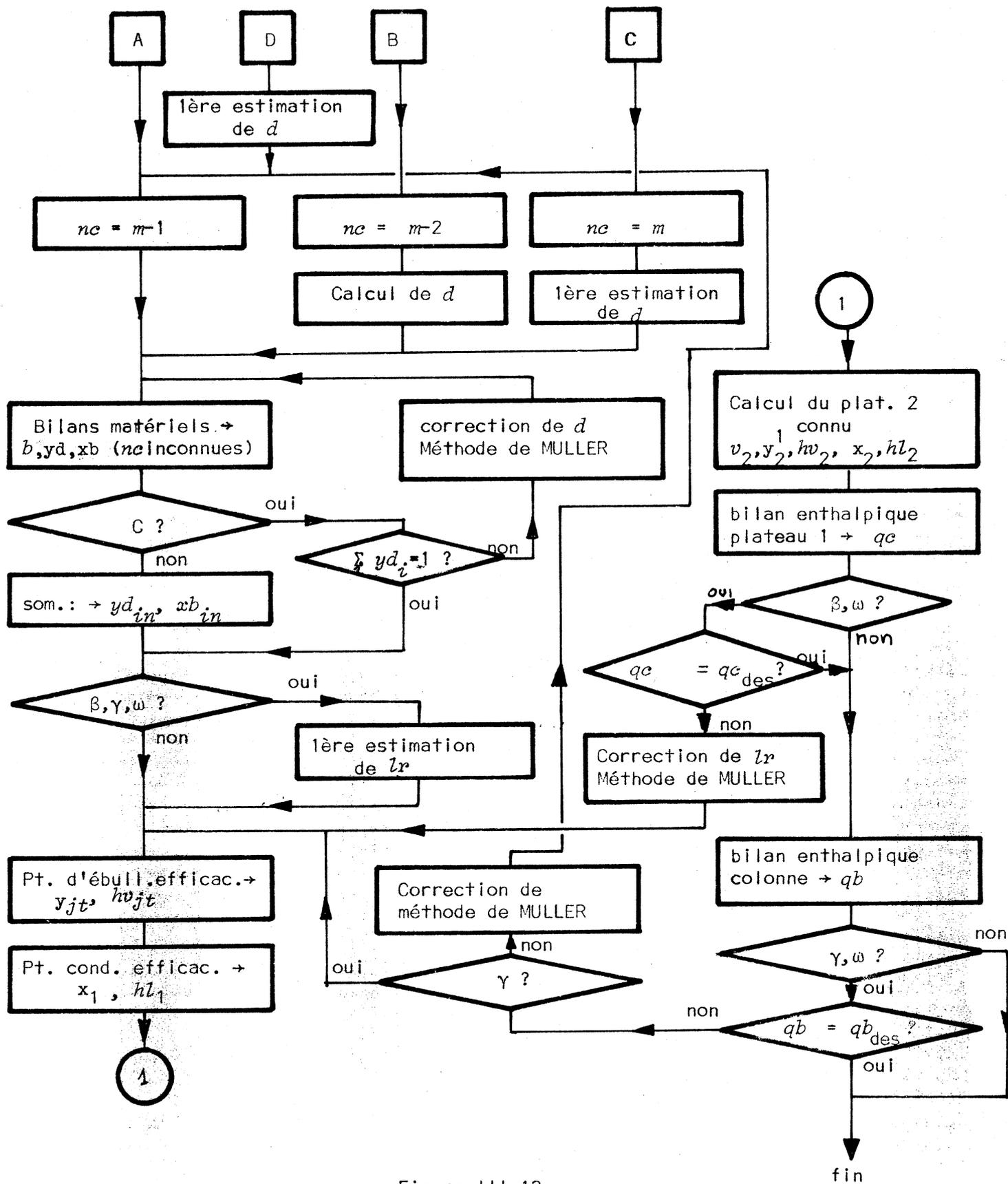


Figure III.12

Schéma d'un plateau complexe, et notations.

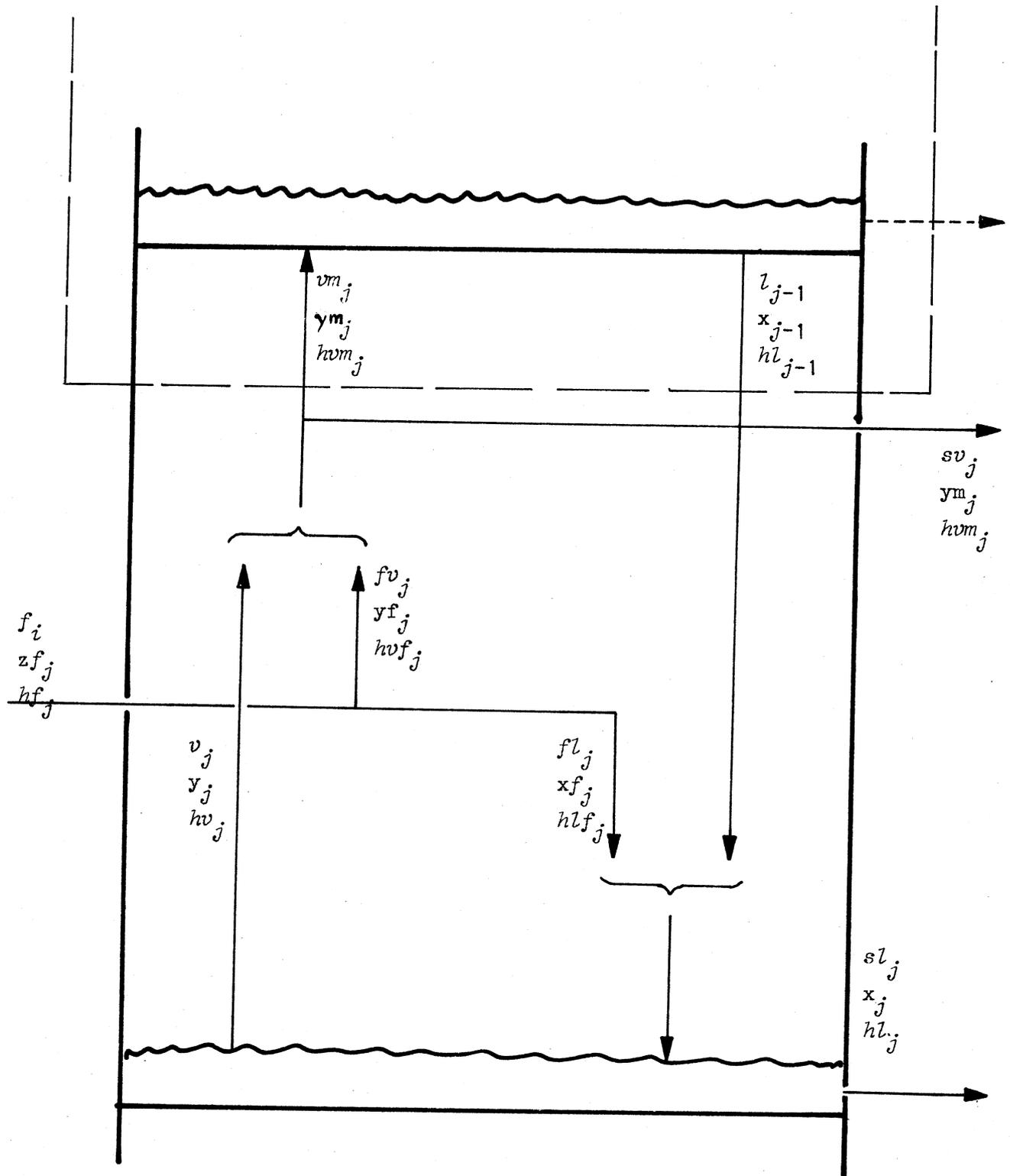


Figure III.13

CHAPITRE IV

METHODE PROPOSEE - PHASE DE CONVERGENCE

IV-1. GENERALITES

La procédure de réduction que nous venons de décrire correspond exactement à la formulation que nous avons donnée au paragraphe III.1.2. Si nous appelons maintenant x^* et f^* les vecteurs d'itération et d'erreur, et n leur dimension, elle définit l'application ϕ^* de \mathbb{R}^n dans \mathbb{R}^n faisant correspondre f^* à x^* :

$$(IV.1) \quad f^* = \phi^*(x^*)$$

et le problème posé est celui de la résolution du système d'équations :

$$(IV.2) \quad \phi^*(x^*) = 0$$

Nous avons de plus montré que la fonction vectorielle ϕ^* était définie dans tout l'intervalle de variation utile du vecteur x^* .

Enfin, la continuité et la dérivabilité de toutes les fonctions intervenant au cours du calcul de réduction entraînent celles de ϕ^* .

Le système (IV.2) se présente alors sous une forme classique et nous nous proposons de lui appliquer une méthode générale de résolution. Ce chapitre IV est principalement consacré à la description de la méthode retenue, de ses modalités possibles de mise en oeuvre, et d'une étude expérimentale visant à donner des critères permettant le choix des paramètres de la méthode dans les applications pratiques.

IV-1.1. Critère de choix de la méthode

La structure de la phase de réduction assure la souplesse et la généralité de la méthode. Le choix de l'algorithme de convergence a pour objectif la réduction du temps de calcul (ce qui suppose aussi une bonne sécurité de la convergence), et l'obtention d'un encombrement raisonnable.

Remarquons que, du fait de la dimension réduite du vecteur d'itération l'encombrement ne sera pas un problème, et l'objectif principal est la minimisation du temps de calcul. De plus le temps de calcul correspondant à la phase de réduction est en général assez long, et représente par exemple, dans les applications traitées plus de 95 % du temps total.

La minimisation du temps de calcul coïncide donc pratiquement avec celle du nombre d'évaluations de ϕ^x nécessaires pour obtenir la solution.

IV.1.2. Norme de f^x , Transformation de f^x et x^x

La solution de la procédure itérative de résolution du système IV.2 est atteinte théoriquement quand $f^x = 0$. En pratique le calcul est interrompu quand f^x est suffisamment proche du vecteur nul, ce qui implique la définition de la distance de deux vecteurs. Nous employons pour cela la norme définie par la relation :

$$(IV.3) \quad v = \omega^x(x^x) = f^{xT} \cdot Q \cdot f^x$$

dans laquelle Q est une matrice de pondération définie positive.

Remarquons que la solution du système (IV.2) coïncide avec la valeur de x^x minimisant la fonction η^x définie par :

$$(IV.4) \quad \eta^x(x^x) = v^2 = f^{xT} \cdot Q \cdot f^x$$

Le problème initial peut donc ainsi être abordé de façon équivalente, quant à la solution obtenue, sous la forme d'un problème de minimisation d'une fonction scalaire de plusieurs variables.

Q étant une matricé carrée positive définie, il est possible de trouver une matrice carrée non singulière RF telle que :

$$(IV.5) \quad Q = RF^T \cdot RF$$

soit le vecteur transformé f de f^* défini par :

$$(IV.6) \quad f = RF \cdot f^*$$

La relation (IV.3) peut alors être écrite sous la forme :

$$(IV.7) \quad v = \eta(x) = f^T \cdot f$$

Cette transformation sur f^* , qui n'est pas indispensable, simplifie un peu l'écriture, conduit à un vecteur d'erreur f transformé dont les éléments ont un poids équivalent, et constitue la symétrique de la transformation sur x^* définie par la relation :

$$(IV.8) \quad x^* = RX \cdot x$$

où RX est une matrice carrée non singulière, et dont l'intérêt sera mis en évidence au paragraphe IV.6.2.

La suite des opérations faisant passer de x à x^* (multiplication par une matrice), de x^* à f^* (calcul de réduction) et de f^* à f (multiplication par une matrice) définit la nouvelle fonction vectorielle :

$$(IV.9) \quad f = \phi(x)$$

Remarquons que si on connaît RX , RF et si on dispose de l'algorithme de réduction défini dans la partie III, ϕ est aisément calculable, et que RX et RF étant des matrices non singulières, le système (III.2) est équivalent au nouveau système.:

$$(IV.10) \quad \phi(x) = 0$$

Par la suite nous travaillons sur x , et f , rejetant ainsi les transformations précédentes au niveau de l'algorithme de réduction.

IV.2. CLASSE DE METHODES EMPLOYEE

IV.2.1. Méthodes possibles

Deux grandes classes de méthodes permettent de résoudre le système d'équations quelconque $\phi(\mathbf{x}) = 0$, (ou de trouver le minimum de la fonction associée $\eta = \mathbf{f}^T \cdot \mathbf{f}$). Ce sont :

1. Les méthodes de résolution ou de minimisation où la solution est atteinte en une seule série d'itérations. Elles comportent un seul point d'attraction qui est la solution.
2. Les méthodes à variation de paramètre, du type de celle proposée par DAVIDENKO {M.6},{M.8},{M.11},{M.5}, qui font intervenir des déplacements successifs du point d'attraction en direction de la solution. Remarquons que le premier type de méthodes peut être considéré comme un cas particulier du second. Nous avons cependant adopté une classification usuelle {M.5}.

Les méthodes du premier type comprennent principalement celles de minimisation sans évaluation de dérivées partielles, {M.9}, celles du gradient (plus profonde descente {M.12},{M.10}, gradient conjugué {M.10}), et celle de Newton {M.12},{M.4}.

Le premier de ces trois groupes a des performances sensiblement inférieures à celles des deux autres, du fait que dans le cas de la résolution d'équations, il n'utilise pas toute l'information disponible, en particulier la connaissance de \mathbf{f} . Nous ne le retiendrons donc pas.

Il a d'autre part été montré, {M.11}, {M.2} que si on ne tient pas compte de la quantité d'information nécessaire, la méthode de Newton a une vitesse de convergence très supérieure à celle des méthodes de gradient, mais par contre le domaine de convergence est généralement plus restreint avec la première qu'avec les secondes.

Si on remarque que, dans le cas de la résolution d'un système d'équation, l'estimation numérique du gradient ou du gradient conjugué de η et celle du Jacobien de ϕ par rapport à x nécessitent le même nombre d'évaluations de ϕ , seul le domaine de convergence joue en faveur des méthodes de gradient.

Dans le cas où on dispose d'une première estimation de x proche de la solution, la méthode de Newton semble préférable. Dans le cas contraire le choix n'est pas immédiat, mais nous verrons qu'une méthode à variation de paramètre constitue une meilleure solution au problème du domaine de convergence qu'une méthode du gradient. Dans le paragraphe IV.7, une première série d'essais confirmera nettement la validité du choix de la méthode de Newton.

Parmi les méthodes à variation de paramètre, utilisant ce que nous venons de dire, nous ne retiendrons que celles faisant usage de la méthode de Newton pour la résolution de chaque étape. En effet, l'intérêt de ce type de méthode est de remplacer le problème initial par une suite de problèmes dans lesquels le point initial fait partie du domaine de convergence de la méthode employée.

Nous venons déjà de faire un choix : celui de la méthode de Newton. Il reste à définir ses conditions d'emploi, seule ou dans le cadre d'une méthode à variation de paramètre ou plutôt à déterminer le nombre d'étapes optimal à utiliser dans ce type de méthodes, une valeur unitaire de ce nombre correspondant alors à la méthode de Newton classique.

Avant d'aborder ce problème, nous commençons par décrire la méthode de Newton, celle de Davidenko, et leurs possibilités de mise en oeuvre.

IV.2.2. Méthode de Davidenko

La méthode de Davidenko [M.6] introduit la fonction ρ de \mathbf{x} et du scalaire s , définie, continue, et dérivable sur l'intervalle $[0,1]$ de s et sur le domaine de définition de ϕ , et telle que la solution de l'équation :

$$(IV.11) \quad \rho(\mathbf{x}, 1) = 0$$

soit connue a priori et que :

$$(IV.12) \quad \rho(\mathbf{x}, 0) = \phi(\mathbf{x})$$

Pratiquement, nous emploierons la fonction suivante :

$$(IV.13) \quad \rho(\mathbf{x}, s) = \phi(\mathbf{x}) - s \cdot f_0$$

qui possède les propriétés requises, dans laquelle :

$$(IV.14) \quad f_0 = \phi(\mathbf{x}_0)$$

où \mathbf{x}_0 est la première estimation de la solution dont on dispose.

La méthode de Davidenko consiste alors à définir une suite de valeurs s_1 à s_{jd} de s_j , telles que :

$$(IV.15) \quad 1 > s_1 > s_2 > \dots > s_j > \dots > s_{jd} = 0$$

et à résoudre successivement les systèmes d'équations :

$$(IV.16) \quad \rho(\mathbf{x}, s_j) = 0, \quad j = 1, jd$$

Il est clair que la solution du système final ($j = jd, s_{jd} = 0$) est, d'après la relation (IV.12), solution de

$$\phi(\mathbf{x}) = 0$$

De plus l'estimation initiale, pour la résolution du système de l'étape j :

$$\rho(\mathbf{x}, \mathbf{s}_j) = 0$$

est la solution du système de l'étape précédente :

$$\rho(\mathbf{x}, \mathbf{s}_{j-1}) = 0$$

On voit ainsi qu'à chaque étape, la distance de la première estimation à la solution est d'autant plus faible, et par conséquent que la fiabilité de l'algorithme est d'autant plus grande, que la variation de ρ par rapport à l'étape précédente est plus faible.

IV.2.3. Méthode de Newton

Chaque étape du calcul précédent consiste en la résolution du système d'équations :

$$(IV.17) \quad \rho(\mathbf{x}, \mathbf{s}_j) = 0,$$

et nous avons indiqué que c'est la méthode de Newton que nous employons pour cette résolution.

L'indice k repérant l'itération croît de une unité à chaque itération, indépendamment du changement éventuel de \mathbf{s} , et un double indexage est utilisé pour représenter les valeurs prises par ρ . A l'étape j , pour l'itération k on obtient les notations suivantes :

$$(IV.18) \quad r_k^i = \rho(\mathbf{x}_k, \mathbf{s}_j)$$

Définissons de plus le pas d'itération k par la relation suivante :

$$(IV.19) \quad \mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k + \mathbf{p}_{k+1} \cdot t_{k+1}$$

où \mathbf{p}_{k+1} est le vecteur déterminant la direction du déplacement de l'extrémité de \mathbf{x} à l'itération k , et t_{k+1} le scalaire fixant l'amplitude de ce déplacement.

Le pas d'itération de la méthode de Newton {M.12}, au cours de l'étape j et pour l'itération k , est alors défini par les relations :

$$(IV.20) \quad p_{k+1} = - H_k \cdot r_k^i$$

$$(IV.21) \quad t_{k+1} = 1$$

où H est l'inverse du Jacobien A_k de ϕ par rapport à x , pour $x = x_k$. (L'élément $a_{i,j}$ du Jacobien est défini par :

$$a_{i,j} = \frac{\partial \phi}{\partial x_j}$$

On constate en effet que la matrice H ne dépend pas de s , mais seulement x , d'où la notation H_k pour l'itération k .

En réalité nous emploierons des méthodes "pseudo-newtoniennes", dans la mesure où, en général, H_k ne sera qu'une approximation de l'inverse du Jacobien, et où la valeur de t_{k+1} pourra être différente de l'unité.

IV.3. DETERMINATION DE LA SUITE DE VALEURS DU PARAMETRE s_j

On peut envisager deux façons de déterminer la suite s_j , $j = 1, j\bar{d}$: la valeur de ses éléments peut être préfixée, ou au contraire dépendre à chaque étape des résultats obtenus au cours des étapes précédentes. Nous allons envisager ces deux cas.

IV.3.1. Valeurs de s prédéterminées

Cette première solution consiste à fixer à priori le nombre $j\bar{d}$ d'étapes et déterminer la valeur des éléments s_j , $j = 1, j\bar{d}$ à partir d'une loi de répartition préfixée (linéaire par exemple). On sait que s_0 (qui ne correspond pas à une étape réelle puisque la solution est connue) doit être unitaire et $s_{j\bar{d}}$ nul.

En fonction du critère défini en IV.1.2, le choix optimal de la valeur du nombre d'étapes jd est obtenu quand le nombre total correspondant d'itérations est minimal.

Pour un système d'équations très non-linéaire et une première estimation éloignée de la solution, le nombre total d'itérations est en général une fonction décroissante de jd pour les faibles valeurs de celui-ci, puis une fonction croissante quand jd augmente. Pour un système plus simple, et avec une meilleure estimation initiale, il est possible qu'au contraire la fonction précédente soit toujours croissante ce qui conduirait à un optimum unitaire pour jd (Méthode simple de Newton).

Comme on le voit la valeur optimale dépend du système d'équations et de la première approximation dont on dispose.

IV.3.2. Valeurs de s calculées

Au contraire du cas précédent, on se sert cette fois, à chaque étape, de l'information fournie par les étapes précédentes pour faire une estimation de la nouvelle valeur de s qu'il est possible de choisir. Nous avons employé une méthode proposée par Broyden [M.5] pour effectuer cette estimation.

La solution du système d'équations :

$$(IV.22) \quad \rho(x, s) = 0$$

est une fonction χ de s uniquement du fait des propriétés supposées de la fonction ρ). Si à l'étape j on utilise les résultats des étapes $j-2$, $j-1$, j , soient les solutions x^{j-2} , x^{j-1} , x^j de (IV.22) pour s_{j-2} , s_{j-1} , s_j , on peut effectuer une approximation du second ordre χ_2 de la fonction χ , soit :

$$\chi_2^j(s) = c_2^j s^2 + c_1^j s + c_0^j$$

où c_2^j, c_1^j, c_0^j sont des vecteurs tels que :

$$x_2^j(s_i) = x^i, \quad i = j-2, j-1, j.$$

Soit maintenant x_1^j l'approximation du premier ordre de x en x^j on a :

$$\left. \frac{dx_1^j}{ds} \right|_{s_j} = \left. \frac{dx_2^j}{ds} \right|_{s_j}$$

d'où

$$x_1^j(s) = (2 c_2^j \cdot s_j + c_1^j) (s-s_j) + x^j$$

Dans la méthode décrite, la valeur de s_{j+1} est choisie de façon à ce que la relation suivante soit vérifiée :

$$(IV.23) \quad \frac{\|x_2^j(s_{j+1}) - x_1^j(s_{j+1})\|}{\|x_1^j(s_{j+1}) - x^j\|} = d$$

où le symbole $\|x\|$ représente la norme euclidienne du vecteur x , ce qui conduit, tous calculs faits à

$$(IV.24) \quad s_{j+1} = s_j \pm d \cdot \|2 c_2^j s_j + c_1^j\| / \|c_2^j\|$$

On choisit la variation négative, la suite des valeurs de s étant décroissante. Le paramètre d est le rapport préfixé entre la norme de la seconde variation et celle de la première variation estimées de x entre l'étape j et l'étape $j+1$.

On peut voir que plus la fonction x est proche de la linéarité, plus la variation de s est importante. Cette méthode, basée implicitement sur l'idée qu'un système d'équations est d'autant plus facile à résoudre qu'il est plus proche d'un système linéaire, effectue ainsi une correction automatique du nombre d'étapes en fonction de la difficulté du problème.

IV.4 DETERMINATION DE L'INVERSE H DU JACOBIEN APPROCHE

Le scalaire g étant constant du cours de chaque étape, on déduit de la relation (IV.13) que les Jacobiens de ϕ et de ρ sont égaux entre eux. Ceci justifie l'emploi d'un seul indice dans la notation H_k , et entraîne qu'on peut aussi bien se servir de ϕ que de ρ pour la détermination de H_k , ce qui est intéressant dans le cas d'une détermination numérique utilisant une des méthodes du paragraphe IV.4.2, ϕ étant continue alors que ρ est discontinue.

Nous avons vu que la fonction ϕ représente le calcul de réduction. Elle n'est pas définie explicitement, du fait en particulier des nombreuses boucles d'itération que celui-ci met en oeuvre. Il n'est donc pas possible d'effectuer une détermination analytique de A_k et H_k . La matrice H_k est donc nécessairement déterminée numériquement, sur la base d'un certain nombre d'évaluations de la fonction .

Remarquons que nous cherchons une estimation de H_k plutôt que de A_k , parce que cela évite une inversion de matrice dans la méthode de Newton, mais que chacune des méthodes indiquées plus loin peut aussi bien être formulée en fonction de A_k .

Nous envisagerons deux types de méthodes permettant d'obtenir une réévaluation de H_k . La méthode de base qui nécessite à chaque itération des évaluations supplémentaires de ϕ pour effectuer un calcul aux différences, les méthodes qui, au contraire, n'utilisent que les évaluations normales correspondant à la progression de l'itération.

IV.4.1. Méthode de base

Dans cette méthode, à l'itération k , \mathbf{x}_k et f_k étant connus on effectue une suite de variations $\bar{p}_i, i = 1, n$ de \mathbf{x}_k , auxquelles correspondent les variations $\bar{y}_i, i = 1, n$ de f_k . Si ces variations sont linéairement indépendantes et de faible amplitude, le développement de f autour de \mathbf{x}_k peut être limité au premier ordre et une approximation H_k

de l'inverse du jacobien peut être calculée. On a en effet, par définition de H_k :

$$(IV.25) \quad H_k \bar{y}_i = \bar{p}_i, \quad i = 1, n$$

Si on appelle \bar{Y}_k^n et \bar{P}_k^n les matrices constituées par la juxtaposition des vecteurs \bar{y}_i , $i = 1, n$, et \bar{p}_i , $i = 1, n$, la relation (IV.25) peut s'écrire :

$$H_k \cdot \bar{Y}_k^n = \bar{P}_k^n$$

d'où l'expression de H_k

$$(IV.26) \quad H_k = \bar{P}_k^n \cdot (\bar{Y}_k^n)^{-1}$$

car en effet les déplacements p_i étant indépendants, \bar{P}_k^n est non singulière, et comme A est non singulière (puisque H_k est supposée exister), \bar{Y}_k^n l'est aussi. ($\bar{Y}_k^n = A_k \cdot \bar{P}_k^n$).

Une façon simple d'obtenir n vecteurs p_i linéairement indépendants est d'effectuer successivement une variation sur chaque composante de x_k . L'amplitude de ces variations doit être choisie de façon à réaliser un compromis entre l'erreur due aux termes d'ordre supérieur à 1 et l'erreur de troncature du calcul numérique.

L'approximation H_k ainsi obtenue est très bonne, et de qualité indépendante du déroulement de l'itération. Mais on constate qu'à chaque pas d'itération il est nécessaire d'effectuer n évaluations supplémentaires de ϕ . Nous verrons cependant au paragraphe IV.6 que les effets de cette exigence peuvent être atténués par l'emploi, pour la détermination de H_k , d'un algorithme de calcul de réduction simplifié.

IV.4.2. Méthodes ne nécessitant pas d'évaluation supplémentaire de ϕ .

Ces méthodes utilisent seulement pour la détermination de H_k , les résultats d'itération et en général une première estimation H_c de H_k . Soit le vecteur y_k défini par la relation::

$$(IV.28) \quad y_k = f_k - f_{k-1}$$

et soient les matrices P_k^l et Y_k^l , de dimensions $(n \times l)$, avec $l \leq n$, formées par juxtaposition des vecteurs p_i , $i = k, k-l+1$, et y_i , $i = k, k-l+1$, et la matrice diagonale $(l \times l)$ T_k^l dont les éléments non nuls sont égaux aux scalaires t_i , $i = k, k-l+1$. La matrice H_k doit alors satisfaire la relation :

$$(IV.29) \quad H_k \cdot Y_k^l = P_k^l \cdot T_k^l$$

Si $l = n$, cette relation suffit à définir H_k (Y_k^l est supposée non singulière) si $l < n$, elle définit alors une famille de matrices parmi laquelle H_k doit être choisi.

Soit la matrice B_k définissant la variation de H à l'itération k :

$$(IV.30) \quad H_k = H_{k-1} + B_k$$

on obtient ainsi :

$$(IV.31) \quad B_k \cdot Y_k^l = P_k^l \cdot T_k^l - H_{k-1} \cdot Y_k^l$$

On peut, sans aucune restriction, écrire B sous une forme généralisée de celle proposée par divers auteurs {M.4}, {M.11}:

$$(IV.32) \quad B_k = P_k^l \cdot T_k^l \cdot (Q_k^l)^T - H_{k-1} \cdot Y_k^l \cdot (Z_k^l)^T$$

où Q_k^z et Z_k^z sont des matrices $(n \times z)$ devant, comme unique condition, satisfaire les relations :

$$(IV.33) \quad (Q_k^z)^T Y_k^z = I_z$$

$$(IV.34) \quad (Z_k^z)^T Y_k^z = I_z$$

où I_z est la matrice unité de dimension z . On vérifie aisément qu'en multipliant à droite chaque membre de (IV.32) par Y_k^z et en utilisant (IV.33) et (IV.34) on retrouve la relation (IV.31).

Dans ces conditions les diverses méthodes existantes peuvent être caractérisées par la valeur de z et les matrices Q_k^z et Z_k^z qu'elles font intervenir.

IV.4.2.a - Méthode de la sécante généralisée

Si on suppose qu'au moins $(n+1)$ itérations ont déjà été effectuées, soit $k < n$ que $z=n$ et que $(Q_k^n)^T = (Z_k^n)^T = (Y_k^n)^{-1}$, il est alors facile de montrer que l'expression de B_k est la suivante :

$$B_k = P_k^n \cdot T_k^n (Y_k^n)^{-1} - H_{k-1}$$

ce qui donne :

$$(IV.35) \quad H_k = P_k^n \cdot T_k^n (Y_k^n)^{-1}$$

On reconnaît la formule classique de la sécante généralisée {M.1}, {M.4}, et on vérifie que dans ce cas ($z=n$) H_k est bien indépendante de H_{k-1} .

Dans cette méthode, H_k est déterminé de manière unique, ce qui est intéressant. Remarquons toutefois que la relation (IV.35) suppose que les n dernières variations de f ont été indépendantes, ce qui peut, nous le verrons dans le paragraphe IV.7, poser parfois un problème.

De plus cette méthode nécessite que $n+1$ itérations aient déjà été effectuées pour pouvoir être mise en oeuvre. Nous verrons que ce problème peut être résolu par des méthodes utilisables dès la première itération, et qui pour $k \geq n+1$ deviendront identiques à celle de la sécante généralisée.

IV.4.2.b. Méthode de Barnes

La méthode de correction de H proposée par BARNES [M.1] suppose que la méthode de convergence employée est celle de Newton (c'est) la seule de celles que nous décrivons où une telle supposition est faite). D'où :

$$P_k = - H_{k-1} \cdot r_{k-1}$$

En remplaçant dans la relation (IV.31) et avec $l=1$ on obtient :

$$B_k \cdot Y_k = - H_{k-1} \cdot r_{k-1} - H_{k-1} \cdot Y_k$$

ou encore :

$$(IV.36) \quad B_k \cdot Y_k = - H_{k-1} \cdot r_k$$

Dans cette méthode, toujours avec $l=1$, $q_k = Q_k^1$ et $z_k = Z_k^1$ sont définis par :

$$Q_k^T = Z_k^T = e_k^T / (e_k^T \cdot y_k)$$

où e_k est un vecteur déterminé plus loin.

d'où :

$$(IV.37) \quad B_k = - H_{k-1} r_k \cdot \frac{e_k^T}{e_k^T \cdot y_k}$$

On vérifie que la relation (IV.36) est bien satisfaite.

Le choix de e_k est effectué de telle façon que H_k soit en concordance non seulement avec les deux dernières itérations, mais avec toutes les précédentes à concurrence de $n+1$. On doit avoir pour l'itération $k-2$:

$$H_k \cdot y_{k-1} = p_{k-1} \cdot t_{k-1} = -H_{k-2} \cdot r_{k-2}$$

or d'après (IV.29) : $H_{k-1} \cdot y_{k-1} = p_{k-1} \cdot t_{k-1}$

d'où la relation :

$$B_k \cdot y_{k-1} = 0$$

ce qui entraîne, par utilisation de (IV.37)

$$e_k^T \cdot y_{k-1} = 0$$

On peut montrer que le même résultat est obtenu pour les itérations précédentes, soit :

$$(IV.38) \quad e_k^T \cdot y_{k-i} = 0, \quad i = 1, \dots, n-1$$

Deux cas peuvent alors se présenter :

- si $k > n$, le vecteur e_k est complètement déterminé : c'est le vecteur orthogonal aux $(n-1)$ vecteurs connus $y_{k-i}, i=1, n-1$ et la méthode est alors équivalente à celle de la sécante généralisée.
- si $k > n$, e_k est orthogonal aux vecteurs $y_{k-1} \dots y_1$, ce qui ne suffit pas à le déterminer. Barnes propose pour lever l'indétermination de choisir pour e_k une combinaison linéaire des vecteurs $y_k \dots y_1$.

Cette méthode permet donc, si on dispose d'une première estimation H_0 , d'effectuer les premières itérations et conduit à la méthode de la sécante généralisée. Elle présente cependant les inconvénients suivants : elle fait une supposition restrictive sur le pas d'itération effectué ($p_k \cdot t_k = -H_{k-1} \cdot r_{k-1}$), et elle nécessite à chaque pas d'itération l'emploi d'une méthode d'orthogonalisation.

IV.4.2.c. Méthode de Broyden généralisée

Nous décrivons ici une forme généralisée de la méthode proposée par Broyden [M.3]. on reconnaîtra aisément que cette dernière correspond au cas où $l=1$.

Dans la forme généralisée, l peut avoir une valeur quelconque (au plus égale à n) et les matrices Q_k^l et Z_k^l , dont on peut vérifier qu'elles satisfont (IV.33) et (IV.34), sont définies par la relation :

$$(IV.39) \quad (Q_k^l)^T = (Z_k^l)^T = [(P_k^l)^T \cdot H_{k-1} \cdot Y_k^l]^{-1} \cdot (P_k^l)^T \cdot H_{k-1}$$

d'où, d'après (IV.32) :

$$(IV.40) \quad B_k = (P_k^l \cdot T_k^l - H_{k-1} \cdot Y_k^l) \cdot [(P_k^l)^T \cdot H_{k-1} \cdot Y_k^l]^{-1} \cdot (P_k^l)^T \cdot H_{k-1}$$

Dans cette relation il est implicitement supposé, pour que P_k^l, T_k^l, Y_k^l existent, que $k \geq l$. Pour pouvoir effectuer les premières itérations, il suffit de remplacer P_k^l, T_k^l, Y_k^l par P_k^k, T_k^k, Y_k^k tant que $k < l$.

Une fois que k est supérieur ou égal à l , deux cas peuvent se présenter : $l=n$ ou $l < n$.
Si $l=n$, les matrices P_k^l, T_k^l, Y_k^l sont des matrices carrées de dimension n , et que si P_k^n, H_{k-1} et Y_k^n sont non-singulières, on obtient pour B_k :

$$B_k = P_k^n \cdot T_k^n \cdot (Y_k^n)^{-1} - H_{k-1}$$

d'où la valeur de H_k :

$$H_k = P_k^n \cdot T_k^n \cdot (Y_k^n)^{-1}$$

qu'on reconnaît comme identique à celle donnée par (IV.35). La méthode décrite est donc équivalente à celle de la sécante généralisée si $l = n$ et $k \geq n$.

Dans le cas où au contraire l est inférieur à n , cette méthode a un sens particulier très intéressant. Soit un vecteur y et son homologue p vis à vis de H_{k-1} :

$$H_{k-1} \cdot y = p$$

et supposons que p soit orthogonal à tous les vecteurs p_k, \dots, p_{k-l+1} constituant P_k^l , ce qui est possible puisque $l < n$. Calculons maintenant la valeur de $H_k \cdot y$. Il est aisé, grâce aux hypothèses faites, de voir qu'on obtient à partir de (IV.30) et (IV.40) :

$$H_k \cdot y = H_{k-1} \cdot y = p$$

Dans ces conditions H_k contient toute l'information fournie par les précédents pas d'itération, c'est-à-dire par les variations $p_k \cdot t_k \dots \dots p_{k-l+1} \cdot t_{k-l+1}$ de x , et les variations correspondantes de f , mais reste équivalente à H_{k-1} vis-à-vis de toute variation p de x effectuée dans une direction orthogonale aux précédentes, c'est-à-dire dans une direction pour laquelle les l pas d'itération précédents n'ont apporté aucune information supplémentaire par rapport à celle contenue dans H_{k-1} .

En ce qui concerne le choix de l , on peut remarquer que plus l est grand, plus on utilise d'informations pour modifier H , mais aussi que l'information supplémentaire est plus vieille. Le choix optimal de l est fonction du système d'équations. Il sera étudié expérimentalement en IV.7.

Cette méthode est aisée à mettre en oeuvre, H_k étant donné par une relation explicite, et ne suppose aucune hypothèse restrictive sur le mode de calcul de p . Nous l'emploierons de préférence à celle de Barnes dans le cas où on veut aboutir à la sécante généralisée ($l=n$).

Remarquons que la méthode proposée par Davidon {M.7}, très utilisée pour la minimisation, ne peut pas être employée ici car elle suppose que H_k est symétrique, ce qui n'est généralement pas le cas dans le problème présent.

IV.5. DETERMINATION DE L'AMPLITUDE DU PAS D'ITERATION

La direction p_{k+1} du déplacement de l'extrémité du vecteur x_k est connue. Il convient de fixer l'amplitude de ce déplacement, en donnant une valeur au scalaire t_{k+1} . La direction étant connue, η est une fonction de t uniquement, et la valeur optimale de t_{k+1} est la valeur de t correspondant au minimum de η .

La valeur théorique de t_{k+1} , c'est-à-dire celle conduisant à la solution en une itération dans le cas où ϕ est linéaire, est unitaire. Cependant, la fonction ϕ étant non-linéaire, cette valeur n'est, en général, pas optimale.

Nous allons envisager deux types de détermination de t_{k+1} : t_{k+1} fixé a priori, t_{k+1} déterminé par minimisation de η . Nous avons également testé des méthodes de modification de t_{k+1} ne nécessitant pas d'estimation supplémentaire de ϕ , mais étant donnés les résultats peu satisfaisants obtenus, il nous a paru inutile de les décrire ici.

IV.5.1. t_{k+1} fixé a priori

Cette façon de donner une valeur à t_{k+1} , qui est évidemment la plus simple, est souvent employée. La valeur utilisée est alors déterminée expérimentalement. On conçoit cependant qu'elle ne puisse être optimale dans tous les cas puisqu'elle devrait, en principe, dépendre de l'estimation initiale, et varier au cours du calcul.

Il est cependant possible que cette approche soit suffisante, étant donné que dans la méthode de Davidenko le point initial de chaque étape est en général assez proche de la solution.

IV.5.2. Détermination de t_{k+1} par minimisation de η

Ce mode de détermination de t_{k+1} fournit la valeur optimale vraie de t_{k+1} et assure, à chaque itération une décroissance de ν . Mais le calcul ne peut être qu'itératif, et nécessite des évaluations supplémentaires de ϕ , d'où une augmentation du temps de calcul. Nous verrons cependant dans le chapitre IV.6 que l'emploi de l'algorithme simplifié de subrésolution peut réduire fortement ce temps de calcul supplémentaire.

L'algorithme itératif de minimisation employé est donné sur la figure IV.1. A chaque itération de cet algorithme une approximation parabolique est effectuée, utilisant les trois derniers points calculés. La nouvelle valeur de t est celle qui minimise la fonction approchée. Le calcul est arrêté quand deux valeurs successives de t sont suffisamment proches. Les trois premiers points utilisés pour démarrer le calcul sont $t = 0$ (connu), $t = 0.5$ et $t = 1$ (calculés).

IV.6. MISE EN OEUVRE PRATIQUE DU CALCUL

L'algorithme de résolution utilise les matrices R_X , R_F , et dans un certain nombre de cas (paragraphe IV.4.2) il nécessite de plus une estimation initiale H_0 de H . Nous indiquons tout d'abord comment on peut choisir pratiquement la valeur de ces matrices.

Nous décrivons ensuite un algorithme de réduction simplifié qui peut servir pour la détermination de H (paragraphe IV.4.1) ou de t (paragraphe IV.5.3) et qui réduit très sensiblement le temps de calcul correspondant.

IV.6.1. Choix de la matrice RF de normalisation de f

La matrice RF a pour but de donner un poids voisin aux éléments du vecteur f. Pour la partie fondamentale de f, c'est l'erreur absolue dysf sur les concentrations qui est déterminante. On a :

$$f_i^{\#} = \text{Log} \frac{ysfb_i + dysf_i}{ysfb_i} \approx \frac{dysf_i}{ysf_i}$$

On ne connaît pas ysf , mais on peut supposer que zf n'en est pas très éloigné. On peut ainsi choisir, pour la partie fondamentale de f :

$$f_i = f_i^{\#} \cdot zf_i$$

La partie correspondante de RF est une matrice diagonale dont les éléments sont les concentrations zf_i .

En ce qui concerne les autres éléments de f, la partie correspondante de RF peut également être diagonale, chaque élément $zf_{i,i}$ étant alors choisi empiriquement selon la précision désirée sur la variable correspondante.

IV.6.2. Choix de la matrice RX de normalisation de

Dans le cas de la méthode de base ou de celle de la sécante généralisée quand $k \geq n$ la valeur de RX n'influe pas sur le déroulement du calcul, et peut alors être quelconque. Par contre dans les autres cas, où un élément arbitraire intervient dans la modification de H, la valeur de RX prend une importance particulière que nous allons montrer sur un exemple.

Plaçons nous dans le cas de la méthode Broyden avec $l=1$. On a :

$$B = \frac{(p_k - t_k - H_{k-1} \cdot y_k) \cdot p_k^T \cdot H_{k-1}}{p_k^T \cdot H_{k-1} \cdot y_k}$$

Dans la suite nous n'écrirons pas les indices k . Appelons dp le vecteur :

$$dp = p \cdot t - Hy$$

et supposons que les éléments de p aient la même valeur p , que les éléments $dp_i/p_i \cdot t$ aient la même valeur e , faible devant l'unité, et que de plus H (en fait H_{k-1}), soit égale à $k \cdot I_n$.

Dans ces conditions B est donnée par la relation :

$$B = e \cdot t \cdot p \cdot p^T \cdot H / \sum_i p_i y_i$$

Les termes diagonaux de B ont même valeur :

$$b_{jj} = e \cdot t \cdot p^2 h_{jj} / \sum_i (p_i \cdot y_i) \quad \text{avec} \quad h_{jj} = h$$

d'où, en valeur relative :

$$b_{jj} / h_{jj} = e \cdot t \cdot p^2 / \sum_i (p_i \cdot y_i)$$

Soit maintenant la transformation suivante sur p :

$$p_1^* = p_1 \cdot 10^{-6} = p \cdot 10^{-6}$$

$$p_j^* = p_j = p, \quad j \neq 1$$

Les éléments de la matrice H prennent les valeurs suivantes :

$$h_{11}^* = h_{11} \cdot 10^{-6} = h \cdot 10^{-6}$$

$$h_{jj}^* = h_{jj} = h, \quad j \neq 1$$

d'où la nouvelle variation relative des termes diagonaux de H :

$$b_{jj} / h_{jj}^* = e \cdot t \cdot p_j^{*2} / \sum_i (p_i^* y_i)$$

soit encore

$$b_{11} / h_{11}^* = 10^{-12} \cdot e \cdot t \cdot p^2 / \sum_i (p_i^* y_i)$$

$$b_{jj} / h_{jj}^* = e \cdot t \cdot p^2 / \sum_i (p_i^* y_i), \quad j \neq 1$$

On voit que, alors que le système et les conditions réelles n'ont pas changé, la valeur relative de la correction du terme k_{11} est 10^{12} fois plus faible que celle des autres termes dans le second cas alors qu'elle était identique dans le premier cas.

Ceci souligne l'importance de la normalisation de x , et montre que, si on considère que la correction en valeur relative, des éléments diagonaux de H doit être proportionnelle aux rapports $dp_i/p_i t$, les éléments de p doivent avoir entre eux, une valeur voisine. Le vecteur p étant, au coefficient t près égal à la différence entre deux valeurs successives de x , ceci entraîne qu'on doit normaliser x de telle façon que ses composantes aient un même ordre de grandeur.

Dans ces conditions si x_0^* est une estimation de la solution, on choisira d'après (IV.8) pour RX la matrice diagonale dont les éléments non nuls sont :

$$rx_{i,i} = x_{0,i}^*$$

Ceci entraîne que la première estimation x_0 est le vecteur dont les éléments sont unitaires.

Remarquons que la transformation logarithmique qui avait été faite antérieurement pour obtenir x^* (voir paragraphe IV.4.8) réduit déjà considérablement la gamme de valeurs des éléments de x^* .

Les résultats expérimentaux ont confirmé la validité de ce choix de RX . Il serait cependant intéressant d'approfondir ce point qui a été traité ici de façon très empirique.

IV.6.3. Première estimation de H

La solution la plus simple pour obtenir une première estimation de H est d'utiliser la méthode de base (paragraphe IV.4.1) pour la première itération. Le temps de calcul supplémentaire nécessité n'est pas excessif si on emploie l'algorithme simplifié donné au paragraphe IV.6.4.

Il est cependant possible, dans le cas où cet algorithme n'est pas mis en oeuvre, d'effectuer une première estimation analytique grossière des éléments de H relatifs aux concentrations. Supposons que x_i^* soit l'élément de x^* correspondant à la concentration yd_i et que f_i^* corresponde à l'erreur sur la concentration ysf_i du plateau d'alimentation, et que de plus yd_i et ysf_i soient relativement faibles. Dans ces conditions une variation de yd_i a peu d'effet sur xb_i et en première approximation la variation de l'erreur est due à celle de $ysfd_i$. D'autre part, si yd_i et ysf_i sont faibles on peut écrire :

$$x_i^* \approx \text{Log } yd_i$$

et, si on fait une variation sur $ysfd_i$ seulement :

$$\frac{d(ysfd_i)}{ysfd_i} \approx \frac{dyd_i}{yd_i}$$

d'où
$$d \text{ Log}(ysfd_i) = d \text{ Log } yd_i$$

ou encore :

$$df_i^* = dx_i^*$$

En première approximation la dérivée partielle $\partial f_i^* / \partial x_i^*$ est unitaire. La partie de $A = \partial f^* / \partial x^*$ correspondant aux concentrations, donc, à condition qu'il y ait correspondance des indices, à donc des éléments diagonaux unitaires. Ne sachant pas fixer une valeur pour les éléments non-diagonaux, et étant donné qu'ils sont en général plus faibles que ceux de la diagonale, on les suppose nuls.

D'où : $A^* = I$

or : $A = RF \cdot A^* \cdot RX$

on obtient donc, toujours pour la même partie de A, l'approximation suivante :

$$A = RF \cdot RX$$

Les éléments de A correspondants à d'autres variables que des concentrations doivent être déterminées par un calcul aux différences, et H est ensuite obtenu par inversion de A.

Nous avons vu que, du fait de l'entrée multiple, ces éléments sont souvent peu nombreux. On réduit ainsi, dans des proportions en général importantes, le nombre des évaluations de ϕ nécessaires pour obtenir la première estimation de H.

IV.6.4. Algorithme simplifié de réduction

L'algorithme simplifié proposé ici est équivalent à l'algorithme normal en un point calculé de celui-ci, et en donne une approximation au voisinage de ce point. La simplification porte sur les équilibres liquide-vapeur et sur le calcul des débits au niveau de chaque plateau, qui représentent la plus grosse part du temps de calcul consommé.

Supposons que pour une certaine valeur X du vecteur d'itération on ait déjà fait un calcul normal de réduction, au cours duquel on aurait gardé en mémoire la valeur des coefficients d'équilibre correspondant à chaque composant sur chaque plateau, celle des enthalpies des phases liquide et vapeur sur chaque plateau, soit au total $(k_{ij}, i=1,m), K_{ij}, h_{vj}, j=1,m$ et celle du débit d (ou b). Dans le calcul simplifié les enthalpies sont gardées inchangées, et les équilibres sont supposés idéaux, avec, comme coefficients de base pour chaque plateau, les coefficients mis en mémoire précédemment. Dans le cas du point

d'ébullition, par exemple, le calcul est le suivant :

$$y_{ij} = \frac{k_{i,j} \cdot x_{i,j}}{\sum_{i=1}^m k_{i,j} \cdot x_{i,j}}$$

Dans ces conditions le calcul est effectué comme dans l'algorithme normal, avec comme seules différences le calcul simplifié des équilibres, et le calcul des débits, qui, du fait des enthalpies constantes, n'est plus itératif. Pour le plateau j de la section supérieure, par exemple, (1.23) et (1.28) conduisent à la résolution classique :

$$l_j = \frac{-d(hw_{j+1} - hwd) - qc}{hw_{j+1} - hl_j}$$

$$v_{j+1} = l_j + d$$

Les seules variables qui ne soient pas calculées dans l'algorithme simplifié sont les températures. S'il arrive qu'on ait besoin de certaines d'entre elles (en particulier si elles interviennent dans le vecteur d'erreur) il faut alors effectuer un calcul normal d'équilibre sur les plateaux correspondants.

On peut vérifier que si on choisit comme vecteur d'itération x celui ayant servi au calcul normal de référence, les résultats obtenus ainsi sont identiques à ceux obtenus avec l'algorithme normal.

Si on emploie cet algorithme pour effectuer un calcul de la matrice H par la méthode de base, ou une minimisation de η , le temps de calcul consommé correspondant est du même ordre de grandeur que celui nécessaire à un calcul normal effectué à l'aide des algorithmes du paragraphe III.2.3.

IV.7. ETUDE EXPERIMENTALE DES DIFFERENTES REALISATIONS DE LA METHODE

DE DAVIDENKO

Nous avons envisagé diverses possibilités pour la détermination des grandeurs s , H et t au cours des chapitres précédents. Le choix à effectuer parmi elles dépend fortement de la forme du système d'équations à résoudre. Ceci entraîne qu'une étude théorique ne peut fournir qu'une aide très faible pour ce choix, du fait qu'on ne sait pas caractériser de façon théorique un système d'équations non-linéaires quelconques.

Dans ces conditions, nous avons été amenés à comparer expérimentalement sur un exemple concret les diverses possibilités envisagées. Il est clair qu'une telle façon de procéder ne prétend pas avoir une portée absolument générale, mais elle peut cependant fournir des renseignements utiles sur la façon d'effectuer le choix de la méthode particulière à employer dans des conditions différentes.

IV.7.1. Système sur lequel l'étude est réalisée

Le choix de la colonne, du mélange distillé, des variables indépendantes a été fait, compte-tenu du nombre important de cas à envisager, de telle façon que le temps de calcul soit réduit, sans restreindre la signification de l'étude.

IV.7.1.a. Colonne étudiée

La colonne étudiée à la structure classique de la figure 1.1. Les plateaux sont supposés idéaux, ce qui réduit le nombre de calculs sans changer fondamentalement la forme du système d'équations. Le nombre de plateaux et la position de l'alimentation adoptés ont été fixés à : $j_t = 52$, $j_f = 27$.

IV.7.1.b. Mélange distillé

Le nombre de composants du mélange est égal à 6, les solutions liquide et vapeur sont idéales et les volatilités relatives (rapport entre deux coefficients d'équilibre) sont constantes.

Dans ces conditions, si on connaît un vecteur de coefficients d'équilibre de base kb , le calcul d'un point d'ébullition est effectué de la façon suivante :

$$y_i = \frac{x_i \cdot kb_i}{\sum_{l=1}^m x_l \cdot kb_l} \quad i = 1, m$$

de même le calcul d'un point de condensation est donné par :

$$x_i = \frac{y_i / kb_i}{\sum_{l=1}^m y_l / kb_l} \quad i = 1, m$$

La valeur donnée aux coefficients de base est la suivante :

$$kb^T = [4,0 \quad 1,2, \dots 1,0 \quad 0,6 \quad 0,3 \quad 0,1]$$

Les enthalpies des phases liquide et vapeur sont de plus supposées constantes, ce qui entraîne que tous les débits de la colonne peuvent être calculés directement si on connaît f, d, l et l'état de l'alimentation. Celle-ci est supposée être constituée par un liquide seul à sa température d'ébullition.

IV.7.1.c. Variables Indépendantes

Les variables indépendantes choisies sont $p, f, z_f, h_f, l_r, y d_4$, ce qui est pratiquement équivalent au choix classique (où $y d_4$ est remplacé par d). Les valeurs choisies sont :

$$z_f^T = [0,01 \quad 0,12 \quad 0,60 \quad 0,23 \quad 0,03 \quad 0,01]$$

$$z_r = 1$$

$$y d_4 = 0,05$$

La pression n'intervient pas explicitement dans les calculs. On suppose seulement que les valeurs numériques adoptées pour les coefficients d'équilibre correspondent à la pression régnant dans la colonne .

IV.7.2. Etude des diverses configurations de la méthode

de Newton

La méthode de Newton étant ici destinée à être intégrée dans le cadre de celle de Davidenko, nous avons choisi pour effectuer cette partie de l'étude une première estimation (estimation n°1) de la solution moyennement éloignée de la solution : si on adopte la référence 1 pour la valeur finale des concentrations faisant partie du vecteur d'itération, leurs valeurs initiales sont respectivement : 10^{-3} , 10, 10^2 , 10^{-3} .

Nous avons testé tout d'abord les méthodes de la plus profonde descente et du gradient conjugué pour confirmer le choix de la méthode de Newton. Dans le cas le plus favorable, c'est-à-dire associées à la méthode de base pour le calcul de H_k et à la détermination de t_{k+1} par minimisation, aucune des deux n'a convergé au bout de 100 itérations, ce qui semble justifier le choix pratiqué.

Nous avons ensuite effectué des essais en employant la méthode de Newton. Les différentes configurations envisagées sont définies par :

- la méthode de détermination de H_k : Méthode de base, de Barnes ou de Broyden (cette dernière a été testée avec $l=1$, $l=3$ et $l=5$)

- la détermination de la première valeur de H_k : fixée a priori comme il est indiqué dans le paragraphe IV.6.3, ou calculée à l'aide de la méthode de base.
- la méthode de détermination de t_{k+1} : t_{k+1} fixé a priori, ou calculé par minimisation.

Nous avons testé toutes les combinaisons, les résultats sont présentés sur les tableaux IV.1 et IV.2.

Le premier indique le nombre d'itérations effectuées, le second le nombre équivalent d'évaluations exactes de ϕ , en supposant que l'algorithme simplifié de réduction est employé pour la détermination de H_k par la méthode de base et pour celle de t_{k+1} par minimisation, le temps nécessaire à chacune de ces opérations étant estimé équivalent à une évaluation exacte de ϕ .

De ces résultats, il ressort que du point de vue du nombre d'itérations, ce sont généralement la méthode de base de calcul de H_k et la détermination de t_{k+1} par minimisation qui donnent les meilleurs résultats, l'intersection des deux donnant le minimum absolu, ce qui paraît normal. C'est cependant le second tableau qui fournit les données les plus intéressantes, car en effet les résultats qui y sont portés représentent sensiblement les temps de calcul nécessaires à chaque configuration. Du point de vue des temps de calcul, c'est la méthode de Broyden, dans les cas $l = 1$ et $l = 3$ qui semble donner les meilleurs résultats, le cas $l = 5$ et la méthode de Barnes étant sensiblement inférieurs dans les deux cas, et le temps supplémentaire consommé dans la méthode de base et la minimisation n'étant pas compensé par le nombre d'itérations plus réduit auxquels ils conduisent.

Dans le cas d'emploi de la méthode de Broyden avec $l = 1$ ou $l = 3$, le temps minimum est obtenu avec les valeurs 1 et 0,8 de t_{k+1} , la valeur 1,2 augmentant trop le risque de non convergence, et la valeur 0,6 ralentissant sensiblement le calcul, résultats qui sont tout à fait cohérents.

L'emploi de l'une ou l'autre des deux déterminations de la première valeur H_0 de H_k est à peu près indifférente dans les configurations conduisant au temps minimal. La sécurité de convergence paraît cependant meilleure dans le premier cas (H_0 calculé par la méthode de base).

Remarquons que les mauvaises performances des méthodes de Barnes et de Broyden avec $l = n$ semblent provenir du fait que la matrice Y_k^n se rapproche, au cours des itérations, d'une matrice singulière, ce qui rend incertain le calcul de la direction du pas d'itération.

IV.7.3. Etude des configurations de la méthode de Davidenko

Pour effectuer cette étude nous avons retenu les meilleurs configurations précédentes : la méthode de Broyden a été employée avec $l = 1, 2, 3$, avec $t_{k+1} = 1$, et en calculant H_0 avec la méthode de base au début de chaque étape. En effet, des essais ont montré que, dans le cadre de la méthode de Davidenko, la valeur $t_{k+1} = 0,8$ donnait des résultats sensiblement moins bons, sans doute parce que le point de départ de chaque étape est assez proche de la solution. De même nous avons inclus le cas $l = 2$, mais non $l = 4$ parce que ce dernier donne des résultats proches de ceux obtenus avec $l = 5$.

Pour effectuer cette étude nous avons utilisé d'une part la valeur initiale du paragraphe précédent : 10^{-3} , 10 , 10 , 10^2 , 10^{-3} , (estimation numéro 1), d'autre part une valeur plus éloignée de la solution : 10^{-6} , 10^3 , 10^3 , 10^3 , 10^{-6} (estimation n°2). Les deux types de détermination de la séquence des paramètres s_j ont été employés. Les résultats sont portés dans les tableaux IV.3 à IV.6.

Remarquons tout d'abord que la méthode de Broyden semble donner les meilleurs résultats avec $l = 1$ ou $l = 2$, alors qu'elle semble peu fiable avec $l = 3$ (tableaux IV.5 et IV.6 en particulier). Nous utiliserons dans ce qui suit les résultats fournis par les deux premières configurations.

Étudions maintenant les résultats obtenus avec une séquence de valeurs s_j prédéterminée. La figure IV.2 représente l'évolution du temps de calcul en fonction du nombre d'étapes, dans le cas $l = 1$, avec les deux points de départ envisagés. On constate dans les deux cas que lorsque le nombre d'étapes augmente, le nombre moyen d'évaluations de ϕ par étape tend vers 2, ce qui entraîne, du fait de l'hypothèse faite sur la détermination de H_0 , que le nombre d'itérations moyen nécessaire à chacune d'elles tend vers 1. Il suffit ainsi, pour garantir la convergence de chaque étape, donc de l'algorithme complet, de choisir un nombre d'étapes suffisamment grand.

Dans le domaine des faibles nombres d'étapes la forme des courbes diffère au contraire : le temps de calcul minimum est situé sur la contrainte gauche (calcul en une seule étape) pour le point de départ n°1, aux environs de la quatrième étape pour le point de départ n°2. Ceci indique que la méthode Davidenko n'apporte une amélioration par rapport à la méthode de Newton simple que dans le cas où le point de départ est assez éloigné de la solution. Remarquons d'ailleurs que la méthode de Newton ne converge pas pour le point de départ n° 2.

La seconde méthode de détermination de la séquence de valeurs s_j semble conduire au contraire à des variations moins importantes du temps de calcul. On remarque de plus qu'il est possible de trouver un intervalle de variation de d donnant satisfaction pour les deux points de départ envisagés : les valeurs comprises entre 0,1 et 0,2 conduisent en effet à des temps de calcul proche du minimum dans les deux cas. Ce résultat s'est confirmé pour une dizaine de points de départ différents pour lesquels nous avons effectué des essais. C'est

une propriété très intéressante car il est ainsi possible de définir à priori des conditions de mise en oeuvre de la méthode qui, si elles ne sont pas optimales, sont très satisfaisantes.

Remarquons que dans le cas de points de départ proches de la solution une légère perte de temps est observée, perte qui correspond aux deux premières étapes qu'il faut fixer arbitrairement pour initialiser l'algorithme de détermination de s .

IV.7.4. Conclusions sur la méthode de convergence

Il découle de l'étude précédente que la configuration qui semble donner les meilleures performances et celle dans laquelle on utilise la méthode originale de Broyden ($l = 1$) pour la détermination de H_k , une détermination de H_0 par la méthode de base, une valeur préfixée de t_{k+1} .

En ce qui concerne la détermination de la séquence de valeurs s_j , la seconde méthode proposée semble donner des résultats très satisfaisants dans tous les cas. Si par contre on est certain de disposer d'une première estimation du vecteur d'itération proche de la solution, la méthode simple de Newton est sans doute à préférer (nombre d'étapes égal à 1).

Remarquons enfin que, dans le cas d'un problème très difficile, on dispose d'un moyen pour assurer la convergence : il suffit d'augmenter le nombre d'étapes.

IV.8. COMPARAISON DE LA METHODE DE RESOLUTION PROPOSEE AUX METHODES EXISTANTES

Nous avons déjà montré que la méthode proposée satisfait aux critères de souplesse (vecteur indépendant choisi arbitrairement) et de généralité (colonne de structure quelconque). Elle possède de ce point de vue, les mêmes caractéristiques que la méthode la plus puissante dans ce domaine, celle de Goldstein et Stanfield.

Pour ce qui concerne les deux autres critères, ceux de temps de calcul et d'encombrement en machine, nous pouvons comparer la méthode proposée à celle de Holland, qui constitue le meilleur compromis parmi les méthodes existantes.

Le volume de mémoire nécessaire est supérieur à celui nécessité par la méthode de Holland, mais reste cependant très modeste : il est en effet possible de traiter sur une machine I.B.M. 1130 de 16K mots de mémoire centrale, une colonne classique de 120 plateaux et 10 composants dans le cas où la procédure simplifiée est incluse, de 120 plateaux et 25 composants dans le cas contraire.

Sur le plan de la rapidité, elle a été comparée à celle de Holland dans les cas suivants : Exemple utilisé dans le chapitre IV.7, colonnes A et B de la partie V, exemple 3.1. de Holland {D.18}. Les résultats sont donnés dans le tableau IV.7. Dans ce tableau, deux chiffres sont donnés pour la méthode proposée : le premier représente le nombre équivalent d'estimations de ϕ , et le second le nombre d'itérations de la méthode de Holland qui conduirait au même temps total de calcul, ceci du fait des différences existant entre les temps d'itération des deux méthodes. Les chiffres à comparer sont ceux des colonnes 2 et 3.

Ces résultats font apparaître que la méthode proposée est plus lente que celle de Holland, la différence restant toutefois peu importante. (Rappelons que cette dernière ne possède par ailleurs pas les autres qualités de la méthode proposée).

En définitive on constate que la méthode proposée satisfait complètement aux quatre critères définis dans l'Introduction, et que ses performances sont très comparables à celles des meilleures méthodes existantes, dans les domaines où elles sont respectivement les plus intéressantes.

En contre partie, elle est d'une programmation un peu plus complexe que les méthodes classiques, du fait de la diversité des cas possibles. L'élaboration d'un programme pouvant prendre en compte toutes les configurations envisagées, et permettant le choix de la configuration au niveau de l'exécution, par simple introduction de données, n'a cependant pas posé de problème particulier.

		Minimisation	$t_{k+1} = 1,2$	$t_{k+1} = 1,0$	$t_{k+1} = 0,8$	$t_{k+1} = 0,6$
Méthode de base		6	8	9	12	16
première valeur H_0 par la méthode de base	Méthode de BARNES	10	NC*	36	30	42
	BROYDEN $l = 1$	10	17	14	10	13
	BROYDEN $l = 3$	7	NC	12	9	15
	BROYDEN $l = n = 5$	7	NC	31	20	50
première valeur H_0 fixée a priori	BARNES	22	NC	NC	20	NC
	BROYDEN $l = 1$	19	18	12	16	25
	BROYDEN $l = 3$	13	NC	11	14	NC
	BROYDEN $l = n = 5$	21	NC	14	NC	NC

TABLEAU IV.1.

METHODE DE NEWTON. NOMBRE EQUIVALENT D'EVALUATIONS DE ϕ .

		Minimisation	$t_{k+1} = 1,2$	$t_{k+1} = 1,0$	$t_{k+1} = 0,8$	$t_{k+1} = 0,6$
Méthode de base		18	16	18	24	32
première valeur H_0 par la méthode de base	Méthode de BARNES	20	NC	37	31	43
	BROYDEN $l = 1$	20	18	15	11	14
	BROYDEN $l = 3$	14	NC	13	10	16
	BROYDEN $l = n = 5$	14	NC	32	21	51
première valeur H_0 fixée a priori	BARNES	44	NC	NC	20	NC
	BROYDEN $l = 1$	38	18	12	16	25
	BROYDEN $l = 3$	26	NC	11	14	NC
	BROYDEN $l = n = 5$	42	NC	14	NC	NC

TABLEAU IV.2.

* N.C. : le calcul n'a pas convergé, ce qui signifie que la solution n'est pas atteinte au bout de 100 itérations, ou que la norme décroît de moins de 10^{-5} en valeur relative pendant 10 itérations consécutives.

METHODE DE DAVIDENKO - POINT DE DEPART N°1

Nombre d'itérations

		Broyden $l = 1$	Broyden $l = 2$	Broyden $l = 3$
Séquence prédéterminée nombre d'étapes	50	62	63	65
	20	33	35	39
	15	30	36	NC
	10	25	27	34
	8	17	17	24
	5	13	19	22
	4	21	18	NC
	3	13	14	14
	2	15	13	16
	1	14	14	12
Seconde méthode de détermination valeur de d	0,05	26	26	32
	0,07	32	24	33
	0,1	14	26	20
	0,2	13	18	27
	0,3	17	23	24
	0,4	21	21	22
	0,5	17	16	16

TABLEAU IV 3

METHODE DE DAVIDENKO - POINT DE DEPART N°1
 NOMBRE EQUIVALENT D'EVALUATIONS DE ϕ

		Broyden $l = 1$	Broyden $l = 2$	Broyden $l = 3$
Séquence prédéterminée nombre d'étapes	50	112	113	115
	20	53	55	59
	15	45	51	NC
	10	35	37	44
	8	25	25	32
	5	18	24	27
	4	25	22	21
	3	16	17	17
	2	17	15	18
	1	15	15	13
Seconde méthode de détermination valeur de α	0,05	35	36	42
	0,07	40	20	41
	0,1	20	33	27
	0,2	18	24	34
	0,3	23	29	29
	0,4	25	25	26
	0,5	20	19	19

TABLEAU IV 4

METHODE DE DAVIDENKO - POINT DE DEPART N°2

Nombre d'itérations

		Broyden $l = 1$	Broyden $l = 2$	Broyden $l = 3$
Séquence prédéterminée nombre d'étapes	50	67	72	75
	20	36	41	88
	15	28	31	72
	10	25	32	NC
	8	22	25	34
	5	21	29	55
	4	21	30	NC
	3	35	27	22
	2	38	35	NC
	1	NC	NC	NC
Seconde méthode de détermination valeur de d	0,05	28	34	79
	0,07	26	27	85
	0,1	33	26	NC
	0,2	21	32	NC
	0,3	30	30	NC
	0,4	30	30	NC
	0,5	34	37	NC

TABLEAU IV 5

METHODE DE DAVIDENKO - POINT DE DEPART N°2

Nombre équivalent d'évaluations de ϕ

		Broyden $l = 1$	Broyden $l = 2$	Broyden $l = 3$
Séquence prédéterminée nombre d'étapes	50	117	122	125
	20	56	61	108
	15	43	46	87
	10	35	42	NC
	8	30	33	42
	5	26	34	60
	4	25	34	NC
	3	38	30	25
	2	40	37	NC
	1	NC	NC	NC
Seconde méthode de détermination valeur de d	0,05	39	44	80
	0,07	35	36	91
	0,1	27	32	NC
	0,2	26	37	NC
	0,3	34	34	NC
	0,4	34	34	NC
	0,5	37	40	NC

TABLEAU IV 6

COMPARAISON DE LA METHODE PROPOSEE AVEC CELLE DE HOLLAND

	Méthode proposée		Méthode de Holland
	Evaluations de ϕ	Itération équiv de Holland	Itérations
Exemple de chapitre V 7	10 à 30	20 à 75	26 ^x
Colonne A (partie VI)	4 à 6	8 à 15	5 à 10 ^x
Colonne B (partie VI)	5 à 15	10 à 38	12 à 50 ^x
Exemple 3. . de Holland	5	10 à 13	7

x dans le calcul pour la méthode de Holland les concentrations sont remplacées par d et z_r dans le vecteur indépendant, cette méthode ne permettant pas de choisir librement ce dernier.

TABLEAU IV 7

ALGORITHME DE CALCUL DE t_{k+1} PAR MINIMISATION DE η

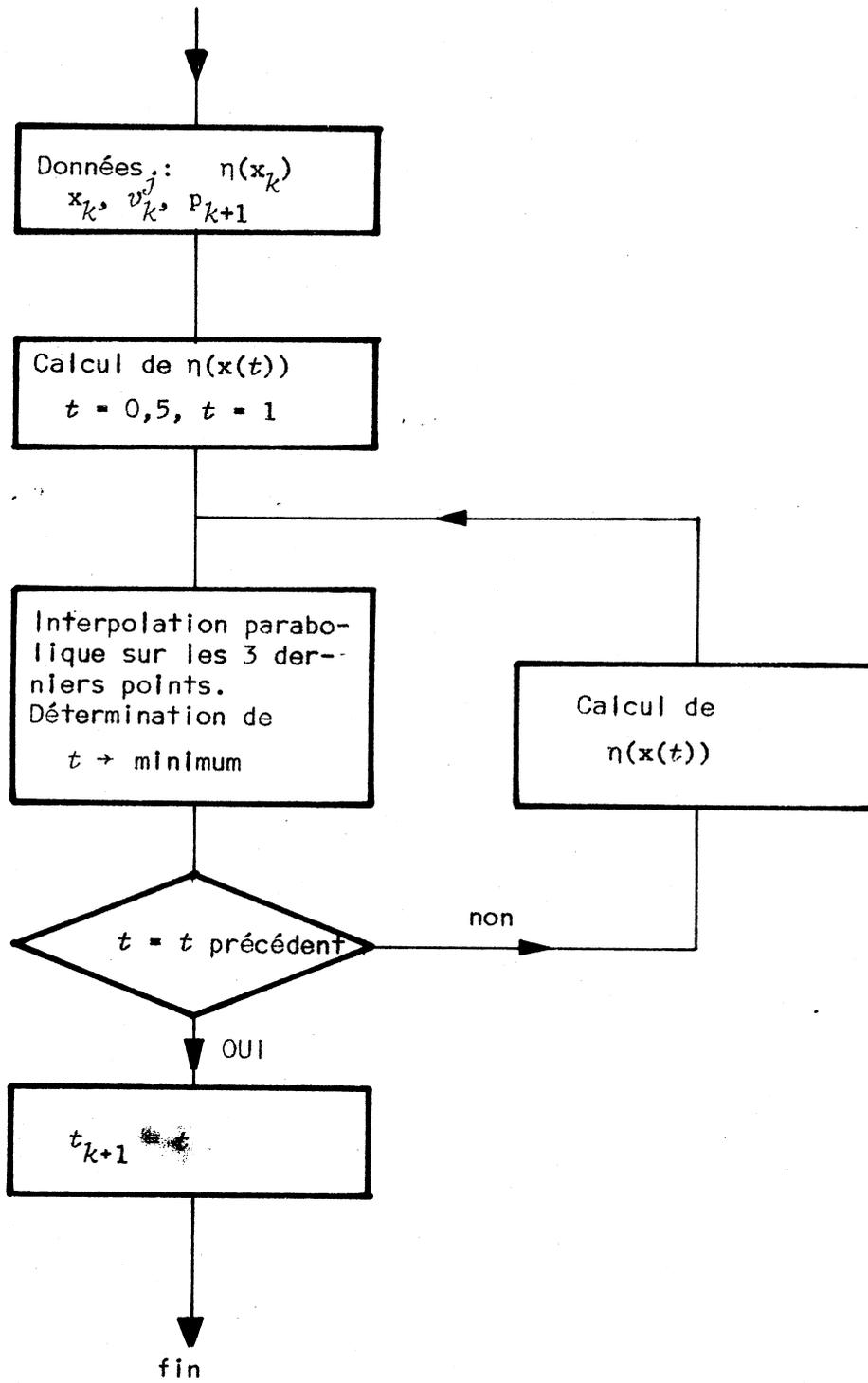


FIGURE IV 1

NOMBRE D'EVALUATIONS DE ϕ EN FONCTION DU NOMBRE D'ETAPES

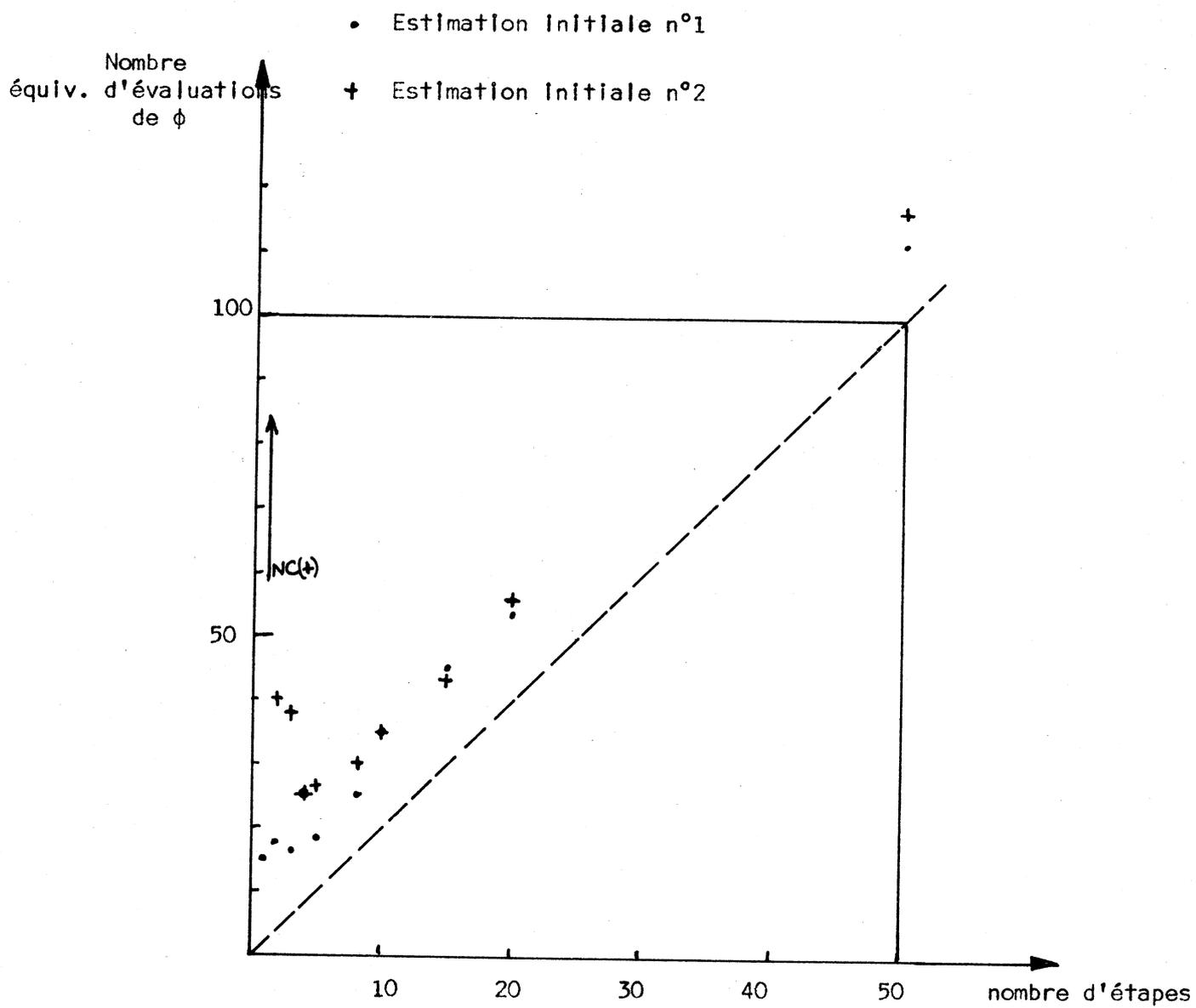


FIGURE IV.2

CHAPITRE V

APPLICATION DE LA METHODE PROPOSEE
DANS LE CADRE D'UN PROBLEME INDUSTRIEL

La méthode que nous venons de décrire a été élaborée et utilisée au cours d'une étude d'automatisation de la partie distillation à basse température d'une unité industrielle de craquage à la vapeur de grande capacité (effectuée dans le cadre indiqué dans l'introduction).

C'est cet exemple d'application que nous décrivons dans cette partie. Une description plus détaillée de cette étude et de ses résultats peut être trouvée dans {D 5}, {D 8 } et {D 21}. Les conditions très diverses dans laquelle elle a été employée font ressortir la souplesse et la généralité de la méthode proposée.

V-1 DESCRIPTION DES INSTALLATIONS.

V-1.1. Procédé étudié.

Le procédé étudié, représenté sur la figure V-1, comporte une colonne terminale à soutirage latéral (A), une colonne médiane conventionnelle (B) et un groupe de deux colonnes couplées (C et D) en entrée. Le mélange constituant l'alimentation de la colonne C contient, en première approximation, 7 hydrocarbures que nous repérerons à l'aide des indices 1 à 7, du plus léger au plus lourd. Les composants 1 et 2 sont presque totalement éliminés en tête des colonnes C et D, les composants 5, 6, 7 en fond de B, et la séparation entre les composants 3 et 4, très voisins, est effectuée dans A.

Remarquons que, bien que les produits des autres soutirages soient également utilisés, c'est le soutirage latéral de la colonne A qui constitue la production utile de l'unité, le produit 3 ayant une valeur très supérieure à celle des autres composants.

V-1.2. Système numérique d'acquisition de données et de commande.

Ce système est constitué d'un calculateur numérique, calculateur du type Télémécanique Electrique - MAT 01, de 8k mots de mémoire centrale et de ses périphériques comprenant les systèmes de sélection des différentes

voies d'entrée de mesures et de sortie de points de consigne, et de conversion analogique-numérique et numérique-analogique, une imprimante dotée d'un lecteur et d'un perforateur de bande, destinée à l'édition du journal de quart et à l'entrée-sortie des programmes, et enfin d'un ensemble d'exploitation en temps réel comportant un pupitre de commande et un système de visualisation numérique des données.

Cette installation, dont le schéma est donné sur la figure V-2, permet la prise en compte de 191 mesures avec une période d'échantillonnage allant de 10 secondes à 20 minutes selon les cas, et l'envoi de 14 points de consigne avec une période d'échantillonnage de 10 secondes. L'opérateur peut choisir en temps réel le type de commande employé, la valeur des différentes consignes, la constitution du journal de quart, la fréquence d'apparition de celui-ci. De plus, un système d'alarmes visuelles et sonores l'avertit immédiatement de toute valeur anormale prise par une mesure ou par une sortie.

V-2. ETUDE EFFECTUEE.

V-2.1. Objectifs poursuivis.

Au moment où l'étude a commencé, seuls quelques niveaux, quelques températures, et la majorité des débits faisaient l'objet de régulations, et l'ensemble de l'unité était pratiquement commandée manuellement. Deux conséquences en découlent.

- Il n'était pas possible de compenser de façon satisfaisante diverses perturbations venant de l'environnement, en particulier des circuits de réfrigération, ni d'effectuer une régulation correcte de certaines parties délicates de l'installation, et la qualité des produits de sortie était assez peu constante dans le temps.
- Du fait de la présence de ces perturbations et de l'absence d'une connaissance quantitative du fonctionnement du procédé, l'opérateur n'était pas en mesure d'essayer de rechercher le réglage optimal du procédé.

De cet état de fait caractérisant la commande manuelle découlent directement les objectifs de la commande automatique mise en oeuvre :

- amélioration de la constance de la qualité, c'est-à-dire de la stabilité du fonctionnement.

- optimisation statique du procédé en fonction d'un critère économique. En effet les changements de régime importants étant peu fréquents, les transitions peuvent être négligées dans un calcul économique. Le critère fixé par les services d'exploitation a été celui de la production maximale de composant 3 (soutirage latéral de la colonne A).

Remarquons qu'en plus de ces objectifs de commande, d'autres conséquences de l'étude étaient espérées comme en particulier une exploitation plus aisée de l'unité et une meilleure connaissance de ce type de procédé.

V-2.2 Structure de la commande.

Le problème de la commande a été traité en deux phases correspondant aux objectifs fixés : régulation et optimisation.

V-2.2.a Régulation.

Une structure à deux niveaux a été employée, tenant compte des propriétés du procédé :

- Régulations "locales", qui font intervenir une petite fraction du procédé dont la dynamique est rapide (exemple : régulations de débit, niveau, température)
- Régulations "globales", de dynamique plus lente, et qui concernent généralement une colonne complète (exemple : régulation de concentration).

Souvent, le point de consigne d'une régulation locale sert de variable d'action pour une régulation globale. De plus, dans chaque régulation, à la partie en réaction est associée une compensation prédictive des perturbations affectant cette régulation. Cette structure est schématisée sur la figure V-3.

Le détail des régulations mises en oeuvre sur le procédé étudié est donné dans le tableau V-1.

V-2.2.b Optimisation.

La mise en place des régulations permet de définir clairement les variables libres : il s'agit ici de pa , pb , pc , xba_3 , xla_4 , xbb_4 , ydb_5 , xbc_2 , ydd_3 , nca , f_0 .

Les pertes en composant 3 étant très faibles, surtout après la mise en place des régulations, le fonctionnement à production maximum coïncide pratiquement avec celui à alimentation maximum, et l'optimum est sans doute situé sur un certain nombre de contraintes.

Une particularité tient au fait que le débit d'alimentation f_0 ne peut être commandé par le calculateur, mais seulement manuellement. La stratégie retenue pour le réglage des autres variables libres consiste alors à choisir, pour une valeur donnée de f_0 , le point de fonctionnement le plus apte à permettre une augmentation de l'alimentation (que seul l'opérateur peut décider). Ce point peut être par exemple celui rendant maximale sa plus petite distance aux n contraintes. Remarquons que cette stratégie satisfait également le critère de sécurité d'exploitation maximale pour une alimentation donnée, ce qui est très intéressant.

Les contraintes sont de deux types : celles portant sur les variables libres, et celles portant au contraire sur des variables liées. Toutes les variables libres citées, sauf f_s , xbc_2 et ydd_3 , font l'objet de restrictions. Les contraintes du deuxième type portent sur les débits lra , lrb , dc (engorgement des colonnes A, B, C), sld , da (ouverture maximum des vannes).

V-2.3. Mise en oeuvre, rôle des modèles statiques.

La détermination des paramètres intervenant dans les régulations et la recherche des points de fonctionnement optimaux peut être réalisée par tâtonnement ou au contraire en faisant usage de modèles mathématiques du procédé. Alors que la première méthode peut être envisagée dans des cas simples, la complexité du procédé étudié et les impératifs de sécurité imposent l'emploi de la seconde méthode, dans toute la mesure du possible.

La détermination des correcteurs en boucle fermée et des transferts prédictifs nécessite la connaissance de modèles dynamiques. Ces modèles ont généralement été déterminés de façon expérimentale (à partir de signaux de tests binaires pseudo-aléatoires). Il a cependant été d'une très grande utilité de disposer de modèles statiques utilisant une caractérisation théorique du procédé. Le choix de la structure des différentes régulations mises en oeuvre a, en effet, été effectué d'après une étude de sensibilité des différentes variables de sortie par rapport aux variables

d'entrée, étude réalisée très facilement à l'aide d'un modèle statique à caractérisation théorique de chaque colonne. De même la détermination du transfert de certaines perturbations dont la valeur ne peut pas être modifiée à volonté, est très difficile. L'utilisation d'un modèle statique de même nature a permis, dans ces conditions, d'obtenir la valeur des paramètres statiques de ces transferts, leur partie dynamique pouvant ensuite être obtenue par tâtonnement.

Mais le développement de modèles statiques a été effectué surtout en vue de l'optimisation statique. Ils permettent en effet d'obtenir une localisation approchée de l'optimum, ce qui dispense de la recherche expérimentale, qui est délicate dans le cas où l'optimum est situé sur des contraintes.

Cependant, dans l'étude présente, la détermination entièrement prédictive de l'optimum suppose qu'on dispose du modèle de l'installation complète, c'est-à-dire des trois colonnes, et des circuits de réfrigération qui créent un couplage entre ces dernières. Or, dès le départ, ne disposant pas des mesures nécessaires, nous n'avons pas pu envisager l'élaboration du modèle de ces circuits, et de plus, en cours d'étude, il s'est avéré impossible d'obtenir un modèle suffisamment précis de l'ensemble C-D, du fait de l'imprécision des données thermodynamiques disponibles, non compensée par un nombre de mesures suffisant. Nous avons ainsi été amenés à employer une procédure plus complexe, comportant en particulier des essais expérimentaux, et à faire de plus l'hypothèse qu'une réduction de la quantité de frigories consommée en un point quelconque de l'unité est un facteur positif. Cette hypothèse a de bonnes chances d'être proche de la réalité, les circuits de réfrigération étant très chargés.

Les étapes successives de la recherche du point de fonctionnement optimal sont les suivantes :

- Etude de la colonne B : x_{bb_4} et y_{d_7} sont choisis égaux à leur valeur maximum admissible de façon à réduire le débit de reflux et la quantité de frigories consommée. Dans ces conditions, le modèle statique montre que, quelle que soit la pression, la contrainte d'engorgement n'est pas atteinte, et que c'est à pression minimale que la consommation de frigories est elle-même minimale (voir paragraphe V-4.5).

- Etude de la colonne A : de même que précédemment les valeurs maximales de xba_3 et yda_4 conduisent aux valeurs minimales de qca et lra . L'usage du modèle statique montre de plus que pour tout le domaine de variation de pa et pour une très large gamme de valeurs de zfa_4 et de zfa_2 , le débit lra n'atteint pas la contrainte d'engorgement de la colonne A. Par conséquent, la contrainte sur lra , de même que celle sur lrb disparaît du problème. Le modèle permet aussi, associé à un modèle expérimental du condenseur de la colonne A, d'exprimer la valeur de da en fonction de celles de fa , zfa et pa , et en utilisant des bilans simplifiés des colonnes B, C et D d'aboutir à la relation suivante (voir paragraphe V-4.3), pour une alimentation donnée (fs , zfc).

$$(V.1) \quad da = \frac{\gamma_1 \cdot xbc_2}{\gamma_2 + \gamma_3 pa}$$

$\gamma_1, \gamma_2, \gamma_3$: fonctions de f_0 et de zfc , ayant des valeurs positives dans tout le domaine de fonctionnement.

- Etude de l'ensemble C-D : la concentration ydd_3 correspond à une perte en produit 3 ; elle a donc été choisie égale à la valeur minimale compatible avec la contrainte sur sld , ce qui correspond aussi à un gain de frigories. Une série d'essais expérimentaux a fait apparaître que les seules variables d'entrée à avoir une influence sur dc sont fc , zfc et xbc_2 . La relation obtenue est la suivante :

$$(V.2) \quad dc = \theta(zfc) \cdot fc - \alpha(xbc_2) \cdot xbc_2$$

En remplaçant fc par sa valeur ($fc = f_0 + da$) on obtient

$$(V.3) \quad dc = \theta \cdot f_0 + \left[\frac{\theta \cdot \gamma_1}{\gamma_2 + \gamma_3 pa} - \alpha(xbc_2) \right] xbc_2$$

$\theta, \gamma_1, \gamma_2$ et γ_3 étant positifs, la valeur de pa minimisant dc est donc le maximum admissible. L'expérience montre de plus que, pour cette valeur, la fonction donnant dc à partir de xbc_2 a toujours un minimum, auquel correspond la valeur optimale de xbc_2 . Si, ensuite, le résultat obtenu pour da (relation V.1) est supérieur à la contrainte, on doit choisir alors pour xbc_2 la valeur conduisant au débit da maximal admissible. Remarquons que ce cas ne s'est jamais présenté.

Le système de commande décrit a permis une amélioration très sensible de la stabilité du fonctionnement, facteur très important pour certains utilisateurs du produit 3. De même, une augmentation de la capacité de production de plus de 1 pour cent a été obtenue, ce qui représente l'amortissement du matériel numérique en un an environ.

Nous avons, dans ce chapitre, mis en évidence le rôle des modèles statiques dans l'élaboration du système de commande. Dans les chapitres qui suivent, après avoir indiqué les conditions expérimentales de l'identification, nous décrivons l'application de la méthode proposée dans les chapitres précédents, à l'élaboration et l'utilisation du modèle statique des colonnes A et B. Le synoptique de l'ensemble de l'étude est donné sur la figure V.5.

V-3 IDENTIFICATION DES COLONNES A ET B.

La méthode de résolution proposée a tout d'abord été employée, au cours de l'identification des colonnes A et B, pour la détermination des paramètres d'adaptation (efficacités). Avant de décrire les configurations employées pour effectuer ce travail, nous indiquons succinctement les conditions expérimentales de l'identification.

V-3.1. Conditions expérimentales de l'identification.

V-3.1.a Obtention des régimes stables.

Le modèle statique d'une colonne est formulé, comme nous l'avons vu dans les parties précédentes, à partir de la connaissance théorique dont on dispose. Cette connaissance n'est cependant pas suffisante pour qu'un modèle purement théorique puisse avoir la précision requise. Une expérimentation est alors nécessaire, en particulier pour déterminer la valeur des coefficients d'efficacité qui sont utilisés comme paramètres d'adaptation.

Cette phase d'adaptation nécessite qu'on dispose de relevés de mesures correspondant à des états stables répartis sur le domaine

de fonctionnement de la colonne. Cette répartition est normalement définie par un plan d'expérience, établi de telle façon qu'on puisse tirer le meilleur parti des relevés. Pour les colonnes A et B, il n'a pas été possible, du fait des impératifs d'exploitation de l'unité, de choisir les points de fonctionnement. Nous avons dû au contraire recueillir le maximum d'information en étudiant le fonctionnement de la colonne tel qu'il se présentait.

L'obtention de régimes très stables est un des points délicats de l'identification. En effet, le procédé est complexe et présente de nombreuses sources possibles de perturbations, et il est apparu pratiquement impossible avec la commande manuelle d'effectuer des relevés satisfaisants.

La mise en place des régulations a amélioré sensiblement la qualité des régimes obtenus, en particulier grâce à la compensation des perturbations agissant au niveau des régulations locales. Cette compensation, très satisfaisante du point de vue de l'exploitation n'est cependant pas toujours suffisante pour l'identification, et d'autre part des perturbations plus lentes, agissant au niveau des régulations globales, c'est-à-dire mettant en jeu tout le procédé, entraînent, même si elles sont parfaitement compensées, que le régime n'est pas stable.

C'est en effectuant des relevés sur des temps très longs et par un dépouillement soigné qu'on a pu sélectionner quelques régimes stables.

V-3.1.b. Prélèvement et traitement des données.

L'influence des bruits de mesure ou des perturbations à fréquence élevée peut en principe être atténuée simplement en effectuant une moyenne sur un temps assez long. Mais cet allongement du temps augmente aussi la probabilité de perturbations à faible fréquence d'apparition.

Nous avons résolu ce problème du choix des échantillons d'une manière très empirique, en profitant d'une mécanisation poussée du traitement des données. La procédure employée est la suivante :

- Enregistrement pendant des temps très longs, de toutes les mesures se rapportant à la colonne étudiée. Cet enregistrement est effectué par le

calculateur de commande, sur bande perforée.

- Utilisation de ces données sur un calculateur scientifique pour le tracé automatique des courbes de variation dans le temps.
- Détermination empirique, à la vue de ces courbes des périodes où le fonctionnement est suffisamment stable pour permettre un calcul d'adaptation.
- Calcul automatique de la moyenne de chaque mesure pendant ces périodes et sortie de ces résultats sur cartes perforées. Celles-ci servent directement de données au programme de calcul des coefficients d'efficacité.

Le choix des relevés expérimentaux comportant une part d'incertitude, les résultats trop éloignés de la moyenne sont par la suite éliminés.

V-3.2 Identification de la colonne A.

V-3.2.a. Mesures disponibles, caractérisation de la colonne.

Au moment d'effectuer l'identification d'une colonne, il convient de définir les paramètres d'adaptation (efficacité) qu'on va faire apparaître dans le modèle. Leur nombre dépend directement du nombre de mesures disponibles sur la colonne (relation 1.77).

Pour la colonne A, les grandeurs disponibles, soit par mesure directe, soit par calcul à partir de mesures, sont les suivantes :

- pression p_a
- débits f_a , d_a , l_{ra}
- concentrations zfa_2 , zfa_4 , zfa_5 , xba_3 , xla_4 ($zfi = 0$ $i = 1,6,7$)
- températures ta_{jl} , ta_{js} , ta_{jt}
- enthalpie hfa

Ces variables, au nombre de 13, forment le vecteur indépendant. Compte tenu des modifications dues au soutirage latéral, la relation (1.77) entraîne qu'on doit employer 4 paramètres d'adaptation ($nea = 4$).

Plusieurs remarques permettent de choisir la nature de ces paramètres :

- Les températures ta_{jl} et ta_{jt} concernent des liquides dont la composition est connue. Elles permettent donc de tester la validité du modèle d'équi-

libre liquide-vapeur employé : nous leur avons fait correspondre deux coefficients d'efficacité de vaporisation (e_3 et e_4). Pour un plateau quelconque, l'efficacité de vaporisation est calculée par interpolation linéaire entre e_3 et e_4 .

- Les concentrations des composants 2 et 5 ne sont pas connues en tête et en fond simultanément. On ne peut donc employer un paramètre spécifique à chaque composant et nous avons retenu un coefficient d'efficacité de Murphree, unique pour tous les composants.
- Deux paramètres étant disponibles, et la section de tête n'étant définie par aucune mesure, nous avons affecté un coefficient d'efficacité de Murphree (e_1) à l'ensemble des sections de tête et médiane, et le coefficient restant (e_2) à la section inférieure.

De plus, dans ce qui suit, c'est la méthode de Benedict-Webb-Rubin [T17] qui a été employée pour la détermination des coefficients d'équilibre et des enthalpies.

V-3.2.b. Calculs d'adaptation, résultats obtenus.

L'adaptation des paramètres d'efficacité est effectuée à l'aide de la méthode proposée. Les vecteurs indépendant, d'itération et d'erreur ont alors théoriquement la constitution suivante :

- Vecteur indépendant : $pa, fa, da, lra, (zfa_i, i = 2, 4, 5), xba_3, xla_4, ta_{jt}, ta_{jd}, ta_{jl}, hfa$.
- Vecteur d'itération : $ea_1, ea_2, ea_3, ea_4, yda_2, yda_4, yda_5, xba_2, xba_5, sla$.
- Vecteur d'erreur : $dta_{jt}, dta_{jd}, dta_{jl}, dysfa_2, dysfa_4, dysfa_5, dxla_4, d \text{ bilan } 2, d \text{ bilan } 4, d \text{ bilan } 5$. Avec :
 $dta_j = ta_j \text{ calculé} - ta_j \text{ désiré}$
 $d \text{ bilan } i = \text{erreur sur le bilan global du composant } i$.

Remarquons que, les autres éléments du vecteur d'itération étant connus, sla peut être calculé directement pour satisfaire le bilan du composant 4. De même yda_5 et xla_5 étant négligeables, le bilan du composant 5 donne directement la valeur de xba_5 . Les vecteurs d'itération et d'erreur sont alors réduits à leurs 8 premiers éléments.

Le nombre d'itérations nécessité pour effectuer ces calculs a varié de 5 à 8, selon la qualité de la première estimation.

Les valeurs moyennes obtenues pour ea_3 et ea_4 sur l'ensemble des essais sont 0,992 et 1,023 respectivement. Comme on pouvait le prévoir, ces résultats ne mettant en jeu que le modèle des équilibres, les valeurs sont peu dispersées : l'écart maximum enregistré par rapport à la valeur moyenne a été de 0,005.

En ce qui concerne les paramètres ea_1 et ea_2 , deux séries d'essais sont à envisager, entre lesquels une modification du procédé est intervenue. Dans la première on dispose d'un ensemble de relevés effectués pour différentes valeurs du débit d'alimentation fa comprises entre 80 et 100 pour cent de la capacité nominale de production. Les résultats, reportés sur la figure V-6 montrent que les efficacités ne varient pas de façon sensible en fonction de l'alimentation.

La seconde série d'essais effectués, après la modification du procédé, au voisinage de la capacité nominale, a eu pour but de fournir les nouvelles valeurs des efficacités ea_1 et ea_2 . Les résultats sont donnés dans le tableau V.4.

La dispersion relative de ces résultats (qu'il a été impossible de corrélérer avec les variations de zfa , lra , qba etc....) semble être due à la difficulté rencontrée pour l'obtention de régimes de fonctionnement parfaitement stables. Il est aussi possible que des encrassements temporaires modifient les caractéristiques de la colonne.

Pour les utilisations du modèle nous avons retenu les valeurs moyennes soit : $ea_1 = 0,38$ et $ea_2 = 0,85$. Les résultats obtenus avec ce modèle ont été comparés avec les relevés expérimentaux ayant servis à son élaboration, puis avec d'autres relevés obtenus en cours d'exploitation. La déviation maximum entre le modèle et la réalité est de l'ordre de 2 pour cent sur le débit de reflux, $0,8^\circ\text{C}$ sur la température du plateau sensible.

V-3.3 Identification de la colonne B.

V-3.3.a Mesures disponibles, caractérisation de la colonne.

Comme nous l'avons dit au paragraphe V-3.2.a, le nombre de paramètres d'adaptation découle directement du nombre de grandeurs connues. Pour la colonne B, ces grandeurs, directement mesurées ou calculées d'après des mesures, sont les suivantes :

- pression p_b
- débits f_b , l_{rb}
- concentrations zfb_2 , zfb_3 , zfb_4 , zfb_6 , zfb_7 , xbb_4 , ydb_5 ($zfb_1 = 0$)
- températures tb_1 , tb_{js} , tb_{jt}
- enthalpie hfb .

La connaissance de ces variables (au nombre de 14), permet, d'après la relation (1.77), d'employer à nouveau 4 paramètres d'adaptation ($neb = 4$).

Les mêmes raisons que dans le cas de la colonne A nous ont conduits à choisir les paramètres suivants :

- eb_1 : coefficient d'efficacité de Murphree de la section supérieure
- eb_2 : " " " " " " inférieure
- eb_3 : coefficient d'efficacité de vaporisation du plateau de tête
- eb_4 : " " " " " " de fond

De même, sur un plateau quelconque, le coefficient d'efficacité de vaporisation adopté est calculé par interpolation linéaire entre eb_3 et eb_4 .

La méthode employée pour la détermination des équilibres liquide-vapeur et le calcul des enthalpies est aussi celle de Benedict-Webb-Rubin.

V-3.3.b. Calculs d'adaptation, résultats obtenus.

Un problème particulier s'est posé lors de l'adaptation des paramètres de cette colonne : les variables xbb_4 et ydb_5 , bien que mesurées toutes deux ne peuvent cependant pas être connues simultanément avec une précision suffisante. En effet ces grandeurs représentent les

taux d'impureté dans les produits de tête et de fond de la colonne B ont des valeurs situées à la limite de sensibilité de l'appareil de mesure utilisé. La précision de la mesure, suffisante pour la mise en oeuvre des régulations, ne l'est pas pour l'identification. La solution retenue a été d'effectuer l'adaptation à partir d'états pour lesquels la valeur de ces concentrations est plus forte que la normale. Pour des raisons de sécurité, les services de production n'ont cependant pas pu accepté que les deux valeurs aient une forte valeur simultanément.

Dans ces conditions nous disposons de deux groupes d'essais, effectués dans des conditions voisines, l'un où xbb_4 est mesuré, l'autre où c'est au contraire ydb_5 . Chaque calcul d'état fournit alors la valeur de trois coefficients d'efficacité seulement. La valeur des 4 paramètres peut cependant être obtenue grâce à la procédure itérative suivante, où on suppose connue initialement l'efficacité eb_1 de la section supérieure :

1. eb_1 étant connue, les valeurs de eb_2 , eb_3 et eb_4 sont calculées à partir des relevés où xbb_4 est mesuré.
2. On donne à eb_2 la valeur moyenne des résultats obtenus à l'étape 1. Si cette valeur est suffisamment proche de la moyenne calculée à l'itération précédente, le calcul est terminé. Sinon, il continue à l'étape 3.
3. eb_2 étant connue, les valeurs de eb_1 , eb_3 et eb_4 sont calculées à partir des relevés où ydb_5 est mesuré.
4. On donne à eb_1 la valeur moyenne des résultats obtenus à l'étape 3. Si cette valeur est suffisamment proche de la moyenne calculée à l'itération précédente, le calcul est terminé. Sinon, il est repris à l'étape 1.

Le calcul des étapes 1 et 3 est toujours effectué à l'aide de la méthode proposée dans les chapitres précédents. Pour l'étape 1 les vecteurs caractéristiques sont les suivants :

- Vecteur indépendant : pb , fb , lrb , $(zfb_i, i = 2,3,4,6,7)$, xbb_4 , tb_1 , tb_{js} , tb_{jt} , hfb , eb_1 .
- Vecteur d'itération : eb_2 , eb_3 , eb_4 , xbb_2 , xbb_3 , ydb_5 , ydb_6 , ydb_6
- Vecteur d'erreur : dtb_1 , dtb_{js} , dtb_{jt} , $(dysfb_i, i = 2,3,4,6,7)$.

Pour l'étape 3 la configuration est au contraire la suivante :

- Vecteur indépendant : $pb, fb, lrb, (zfb_i, i = 2,3,4,6,7), ydb_5, tb_1, tb_{js}, tb_{jt}, hfb, eb_2$.
- Vecteur d'itération : $eb_1, eb_3, eb_4, xbb_2, xbb_3, xbb_4, ydb_6, ydb_7$
- Vecteur d'erreur : $dtb_1, dtb_{js}, dtb_{jt}, (dysfb_i, i = 2,3,4,6,7)$

Le nombre d'itérations nécessité pour les calculs d'état de la colonne a varié entre 9 et 18. Les résultats de la procédure itérative de calcul de eb_1 et eb_2 sont donnés dans le tableau V.5.

Le modèle obtenu ($eb_1 = 0,766, eb_2 = 0,959, eb_3 = 1,008, eb_4 = 1,017$) a été comparé à un ensemble d'essais effectués à débit et concentrations d'alimentation constants. Les résultats sont donnés sur les figures V7 et V8. Comme on le voit, ils peuvent être considérés comme satisfaisants.

V-4 UTILISATION DES MODELES DES COLONNES A ET B.

Les modèles des colonnes A et B ont été utilisés dans le cadre de l'étude de commande décrite dans le chapitre V-2.

V-4.1. Etude de sensibilité de la colonne A.

Cette étude a été effectuée pour déterminer la structure à adopter pour les régulations globales. A partir d'un état de référence, des variations sont effectuées successivement sur chacune des variables d'action et de perturbation, permettent d'évaluer la sensibilité des variables de sortie par rapport aux variables d'entrée.

Dans ces conditions les variables d'action et de perturbation doivent, dans ces calculs, faire partie du vecteur indépendant. Les vecteurs caractéristiques sont les suivants.

- Vecteur indépendant : $pa, fa, da, lra, ta_{js}, (zfa_i, i = 2,4,5), hfa, ea_1, ea_2, ea_3, ea_4$.
- Vecteur d'itération : $yda_2, yda_4, yda_5, xba_2, xba_3, sla$ (xla_4 ne faisant pas partie du vecteur indépendant, sla ne peut être calculé directement).

- Vecteur d'erreur : $dysfa_2$, $dysfa_4$, $dysfa_5$, dta_{js} , d bilan 2, d bilan 4.

Ces calculs d'états effectués en 4 à 6 itérations, ont pu mettre en évidence par exemple, au voisinage du fonctionnement normal ($xla_4 = 0,0013$, $xba_3 = 0,008$), que l'influence de la température du plateau sensible ta_{js} est forte sur xla_4 , plus faible sur xba_3 , alors que le débit de reflux lra n'agit de façon sensible que sur xba_3 . D'où la structure employée pour la régulation de xla_4 et xba_3 : deux boucles en réaction associent lra à xba_3 et ta_{js} à xla_4 et une action prédictive, additionnant à lra un terme fonction de ta_{js} , diagonalise la matrice de transfert. En réalité, c'est le débit du reflux "interne" $lria = lra - sla$ qui a été effectivement utilisé, et qui pour une alimentation donnée, est égal au débit de reflux lra à une constante près, ce qui permet de garder ce dernier libre pour la régulation locale de niveau du bac de reflux (tableau V.1).

Cette étude a également mis en évidence la nécessité de compensation prédictive des variations du débit fa et de la concentration zfa_4 de l'alimentation, et, dans une moindre mesure de la pression pa .

V-4.2 Détermination des compensations prédictives de la colonne A.

Les compensations à effectuer lors d'une variation des variables de perturbation n'étant pas linéaires, nous nous servons directement du modèle statique pour en déterminer la valeur selon le schéma de la figure V.9.

Les variables indépendantes du modèle sont cette fois les variables de perturbation et les variables régulées (xla_4 , xba_3), les variables d'action étant alors calculées. Seules les variations de ces dernières sont prises en compte, et, après passage à travers un filtre dont les paramètres sont ajustés expérimentalement, sont ajoutés à la valeur fournie par les correcteurs des boucles de réaction.

Le modèle statique complet, pour des raisons d'encombrement et de temps de calcul, ne peut être introduit dans le calculateur de commande. Il a ainsi été nécessaire d'utiliser un modèle simplifié, d'encombrement et de temps de calcul réduits. Ce modèle simplifié est obtenu par régression à partir d'un ensemble d'états déterminés à l'aide

du modèle rigoureux.

La configuration de calcul de ces états est la suivante :

- Vecteur indépendant : $pa, fa, da, (zfa_i, i = 2,4,5), xla_4, xba_3, hfa, ea_1, ea_2, ea_3, ea_4$.
- Vecteur d'itération : $yda_2, yda_4, yda_5, xba_2, lra$.
- Vecteur d'erreur : $dysfa_2, dysfa_4, dysfa_5, dxla_4, d$ bilan 2.

Les variables zfa_2, zfa_5 et hfa ayant peu d'influence sur les régulations, leurs valeurs ont été maintenues constantes, et un ensemble d'états ont été calculés en faisant varier les autres variables indépendantes. Les résultats, obtenus, en 4 à 7 itérations, sont donnés dans le tableau V.6.

A partir de ces résultats on a pu construire le modèle simplifié ayant la forme suivante :

$$(V.4) \quad lria = fa \{ ar_1 + br_1 / (xba_3 + cr_1) + ar_2 + br_2 / (xla_4 + cr_2) + ar_3 + br_3 / (xba_3 + cr_3) \cdot (ar_4 + br_4 \cdot xla_4) (pa - pa_0) + ar_6 + br_6 / (xba_3 + cr_6) \cdot (ar_5 + br_5 \cdot zfa_4) \}$$

$$(V.5) \quad ta_{js} = at_1 + bt_1 / (xba_3 + ct_1) + at_2 + bt_2 / (xla_4 + ct_2) (at_4 + bt_4 \cdot zfa_4) + at_3 + bt_3 / (xba_3 + ct_3) (pa - pa_0) + (at_6 + bt_6 \cdot xba_3) (at_5 + bt_5 \cdot zfa_4)$$

La forme hyperbolique des courbes a été choisie parce que, dans ce cas particulier, elle permet d'obtenir une bonne précision dans un large domaine avec un nombre restreint de paramètres. Les valeurs des paramètres al, br, cr, at, bt, ct obtenus sont données dans le tableau V.7.

L'erreur introduite par cette simplification du modèle reste inférieure, dans tout le domaine de fonctionnement, à 0,2 pour cent pour lra , 0,05°C pour ta_{js} , ce qui est très inférieur à la marge d'incertitude propre du modèle rigoureux.

V-4.3. Utilisation du modèle de la colonne A pour l'optimisation.

Le modèle de la colonne A a été utilisé d'une part pour montrer que lra reste inférieure à la contrainte d'engorgement de la colonne, d'autre part pour établir la relation (V.1).

Dans tous les cas la configuration du calcul d'état est la même que pour la détermination du modèle simplifié des compensations prédictives.

Une série de calculs d'états montre que le débit de reflux lra n'est pratiquement pas dépendant de la concentration zfa_2 , et que pour un débit d'alimentation supérieur de 3 pour cent au maximum atteint expérimentalement, le débit de reflux lra reste inférieur à sa valeur maximum admissible. Ces résultats sont portés sur la figure V.10.

Pour établir la relation V.1, un nouveau modèle simplifié a été élaboré à partir d'une seconde série de calculs d'état, dont les résultats sont donnés dans le tableau V.8. Ce modèle fournit la valeur de la température de tête ta_1 , et celle de la puissance calorifique du condenseur. Il est constitué par les relations :

$$(V.6) \quad ta_1 = 208,95 - 40,7.zfa_2.fa/da + 1,80.pa$$

$$(V.7) \quad qca = -fa \cdot 5890 + 152,0.pa + 1900.zfa_2.fa/da$$

De plus, un bilan massique γ approché des colonnes B, C et D donne :

$$(V.8) \quad zfa_2 \simeq xbc_2 \cdot (\sum_{i=3}^7 zfc_i) / (zfc_3 + zfc_4) = \lambda(zfc) \cdot xbc_2$$

$$(V.9) \quad fa \simeq fo \cdot (zfc_3 + zfc_4) / (\sum_{i=1}^7 zfc_i) = \eta(zfc) \cdot fo$$

Si on dispose de plus d'un modèle expérimental du condenseur :

$$(V.10) \quad qca = -ca (ta_1 - tea)$$

il est aisé d'obtenir l'équation

$$(V-11) \quad da = \frac{40,7.ca.\lambda(zfc).\eta(zfc)fo+1900\lambda(zfc)\eta(zfc)^2fo^2.xbc_2}{ca.(208,95-tra)-5890.\eta(zfc).fo+[1,80.ca-152,0\eta(zfc)fo]pa}$$

D'où la relation V.1.

V-4.4 Etude de sensibilité de la colonne B.

Cette étude est effectuée dans la même optique que celle menée pour la colonne A. La configuration des calculs d'état est la suivante :

- Vecteur indépendant : pb , fb , lrb , tb_{js} , (zfa_i , $i = 2,3,4,6,7$), hfb , eb_1 , eb_2 , eb_3 , eb_4 .
- Vecteur d'itération : xbb_2 , xbb_3 , xbb_4 , ydb_5 , ydb_6 , ydb_7
- Vecteur d'erreur : ($dysfb_i$, $i = 2,3,4,6,7$), dtb_{js}

Ces calculs d'état, effectués en 5 à 15 itérations, ont ainsi pu mettre en évidence que, dans des conditions normales de fonctionnement ($ydb_5 = 0,00025$ $xbb_4 = 0,0005$), le débit de reflux n'agit de façon sensible que sur la concentration en tête ydb_5 et la température tb_{js} sur la concentration en fond xbb_4 . D'où la mise en oeuvre de deux boucles de régulation pratiquement indépendantes.

Remarquons que, la mesure des concentrations de l'alimentation n'étant pas suffisamment précise, il n'a pas été possible de mettre en oeuvre des compensations prédictives par rapport à ces concentrations.

V-4.5 Utilisation du modèle de la colonne B pour l'optimisation.

Le modèle de la colonne B a été utilisé pour déterminer la valeur de la quantité de chaleur consommée qcb en fonction de la pression pb de fonctionnement, et en déduire la valeur optimale de cette dernière.

La configuration employée pour effectuer les calculs d'état correspondants est la suivante :

- Vecteur indépendant : pb , fb , (zfa_i , $i = 2,3,4,6,7$), xbb_4 , ydb_5 , hfb , eb_1 , eb_2 , eb_3 , eb_4
- Vecteur d'itération : xbb_2 , xbb_3 , ydb_6 , ydb_7 , lrb
- Vecteur d'erreur : ($dysfb_i$, $i = 2,3,4,6,7$)

Le nombre d'itérations nécessité a été compris entre 6 et 16. Les résultats obtenus avec les valeurs maximales admissibles de xbb_4 et ydb_5 et avec des valeurs moyennes des concentrations d'alimentation, sont donnés sur la figure V11. On en déduit que la valeur opti-

male de la pression p_b est la valeur minimale admissible.

V-5 CONCLUSIONS SUR LES APPLICATIONS EFFECTUEES.

La diversité des applications décrites et les difficultés rencontrées dans l'identification (impossibilité d'obtenir un modèle de l'ensemble C-D, précision médiocre du modèle de la colonne A) permettent de situer l'apport de la méthode dans le cadre d'une étude d'automatique : sa souplesse en permet l'emploi pour tout problème faisant intervenir un modèle de colonne, quelle qu'en soit la formulation. Les difficultés d'ordre mathématique étant ainsi levées, les conditions essentielles de l'étude d'automatique apparaissent plus nettement, comme par exemple, pour l'identification, la nécessité de disposer d'une caractérisation très fine du procédé, ou au contraire d'un nombre important de mesures, la stationnarité du procédé, etc....

On peut dire que dans cette étude, l'emploi de la méthode proposée a permis d'aborder les problèmes d'automatique dans de bonnes conditions.

	variable régulée	variable d'action	variables compensées
régulations locales	<i>pa</i>	<i>nca</i>	
	<i>nca</i>	<i>da</i>	
	<i>lria</i>	<i>sla</i>	<i>lra</i>
	<i>nra</i>	<i>lra</i>	<i>ta_{js}, fa</i>
	<i>ta_{js}</i>	<i>qba</i>	<i>lria</i>
rég. globales	<i>xla₅</i>	<i>ta_{js}</i>	<i>zfa₄, pa</i>
	<i>xba₄</i>	<i>lria</i>	<i>ta_{js}, fa, zfa₄, pa</i>

Remarque : seules les régulations assurées par le calculateur sont indiquées

TABLEAU V 1

REGULATION DE LA COLONNE B

	variable régulée	variable d'action	variables compensées
rég. locales	<i>pb</i>	<i>nrb</i>	
	<i>nrb</i>	<i>db</i>	<i>fb</i>
rég. globales	<i>ydb₅</i>	<i>lrb</i>	<i>fb</i>
	<i>xbb₄</i>	<i>tb_{js}</i>	<i>pb</i>

TABLEAU V 2

REGULATION DE L'ENSEMBLE C - D

	variable régulée	variable d'action	variables comensées
rég. loc.	<i>nrd</i>	<i>lrd</i>	
rég. globales	<i>ydd₃</i>	<i>sld</i>	
	<i>xbc₂</i>	<i>qcc</i>	

TABLEAU V 3

EFFICACITES DE LA COLONNE A

état n°	ea_1	ea_2
1	0,365	0,791
2	0,380	0,818
3	0,407	0,887
4	0,357	0,885
5	0,376	0,901
6	0,379	0,883
7	0,385	0,831

TABLEAU V 4

IDENTIFICATION ITERATIVE DE LA COLONNE B

étape	eb_1	eb_2
1	0,7200	0,9590
3	0,7659	0,9590
1	0,7659	0,9592

TABLEAU V 5

DETERMINATION DU MODELE SIMPLIFIE DE LA COLONNE A DESTINE A
LA COMMANDE PREDICTIVE

pa	zfa_4	xla_4	xba_3	lra/fa	$lria/fa$	ta_{js}
pa_0	0,18	0,001	0,005	3,729	2,924	255,52
pa_0	0,18	0,001	0,01	3,693	2,889	252,99
pa_0	0,18	0,001	0,025	3,662	2,861	250,87
pa_0	0,18	0,0005	0,01	3,967	3,164	252,52
pa_0	0,18	0,0015	0,01	3,555	2,750	253,26
pa_0	0,18	0,0015	0,005	3,589	2,784	255,81
pa_0+1	0,18	0,001	0,005	3,846	3,041	257,77
pa_0+1	0,18	0,001	0,01	3,803	2,999	255,11
pa_0+1	0,18	0,001	0,025	3,767	2,965	252,82
pa_0+1	0,18	0,0015	0,01	3,654	2,850	255,39
pa_0	0,22	0,001	0,005	3,74	2,981	256,69
pa_0	0,22	0,001	0,01	3,702	2,939	254,11
pa_0	0,22	0,001	0,025	3,663	2,903	251,83
pa_0	0,22	0,0005	0,01	3,971	3,208	253,55
pa_0	0,22	0,0015	0,01	3,569	2,805	254,42

TABLEAU V 6

COEFFICIENTS DU MODELE SIMPLIFIE DE A

	<i>ar</i>	<i>br</i>	<i>cr</i>	<i>at</i>	<i>bt</i>	<i>ct</i>
1	2,8380	0,000625	0,00227	249,06	0,0500	0,00275
2	- 0,5621	0,000856	0,000522	1,127	- 0,00234	0,000850
3	0,0988	0,000146	0,00300	1,718	0,00822	0,01045
4	- 1,02	- 20,0		0,325	3,75	
5	- 4,5	25,0		- 4,50	25,0	
6	0,03277	0,000298	0,00731	1,22	-10,0	

TABLEAU V 7

DETERMINATION DU MODELE SIMPLIFIE DE A DESTINE A
L'OPTIMISATION

pa	zfa_2	da/fa	ta_1	$- qca/fa$
18,5	0,005	0,020	232,11	9237
18,5	0,0075	0,040	237,12	8949
18,5	0,015	0,050	229,61	9309
20	0,005	0,020	234,85	9425
20	0,005	0,040	239,79	9177
20	0,0075	0,025	241,39	9515
20	0,0075	0,030	231,85	9427
20	0,0075	0,040	237,41	9266
20	0,0075	0,050	238,83	9200
20	0,010	0,040	234,84	9424
20	0,015	0,050	241,39	9515
21,5	0,005	0,020	237,61	9608
21,5	0,0075	0,040	242,45	9425
21,5	0,015	0,050	235,23	9673

TABLEAU V 8

SCHEMA DE L'INSTALLATION NUMERIQUE

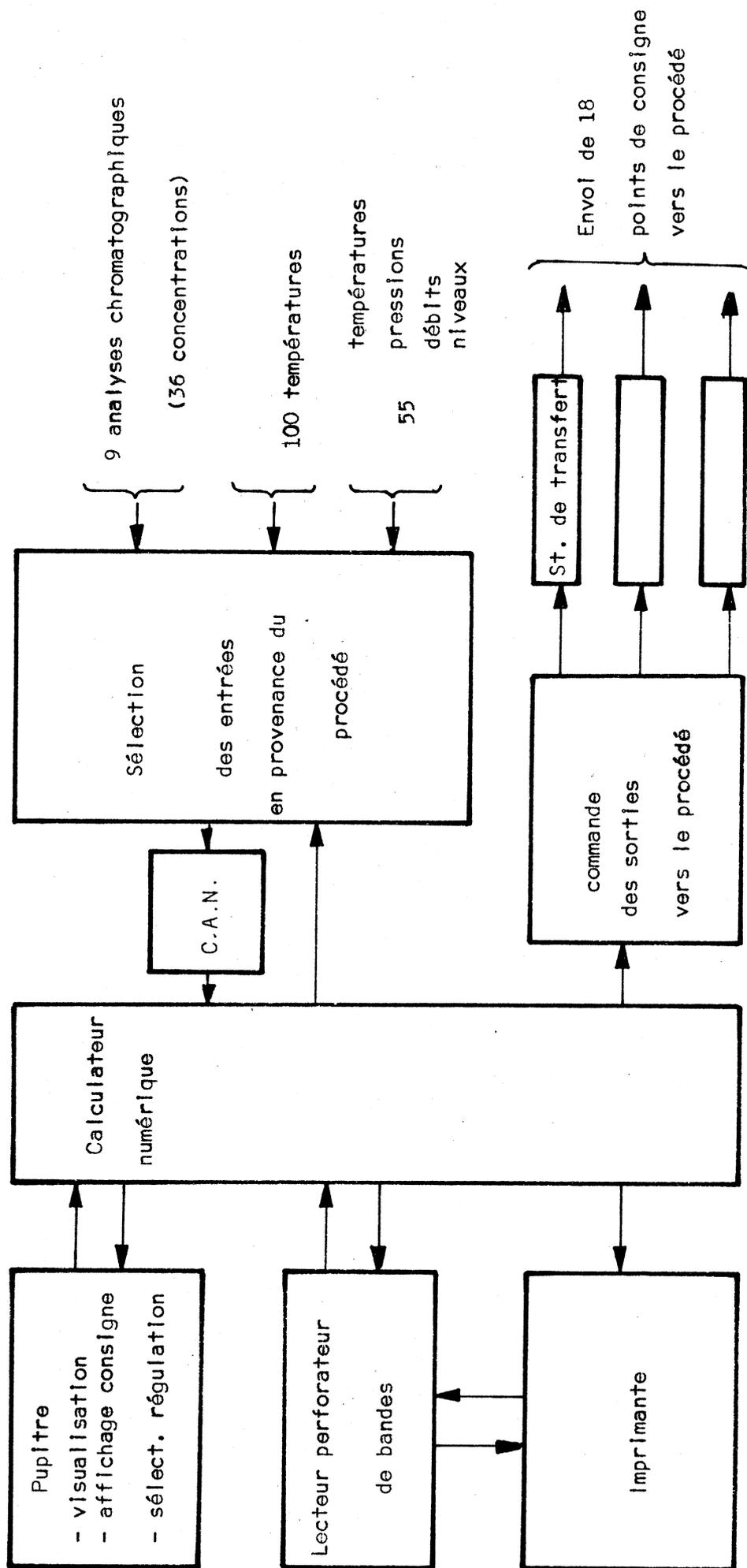


FIGURE V 2

DIAGRAMME FONCTIONNEL DU SYSTEME (EN VUE DE L'OPTIMISATION)

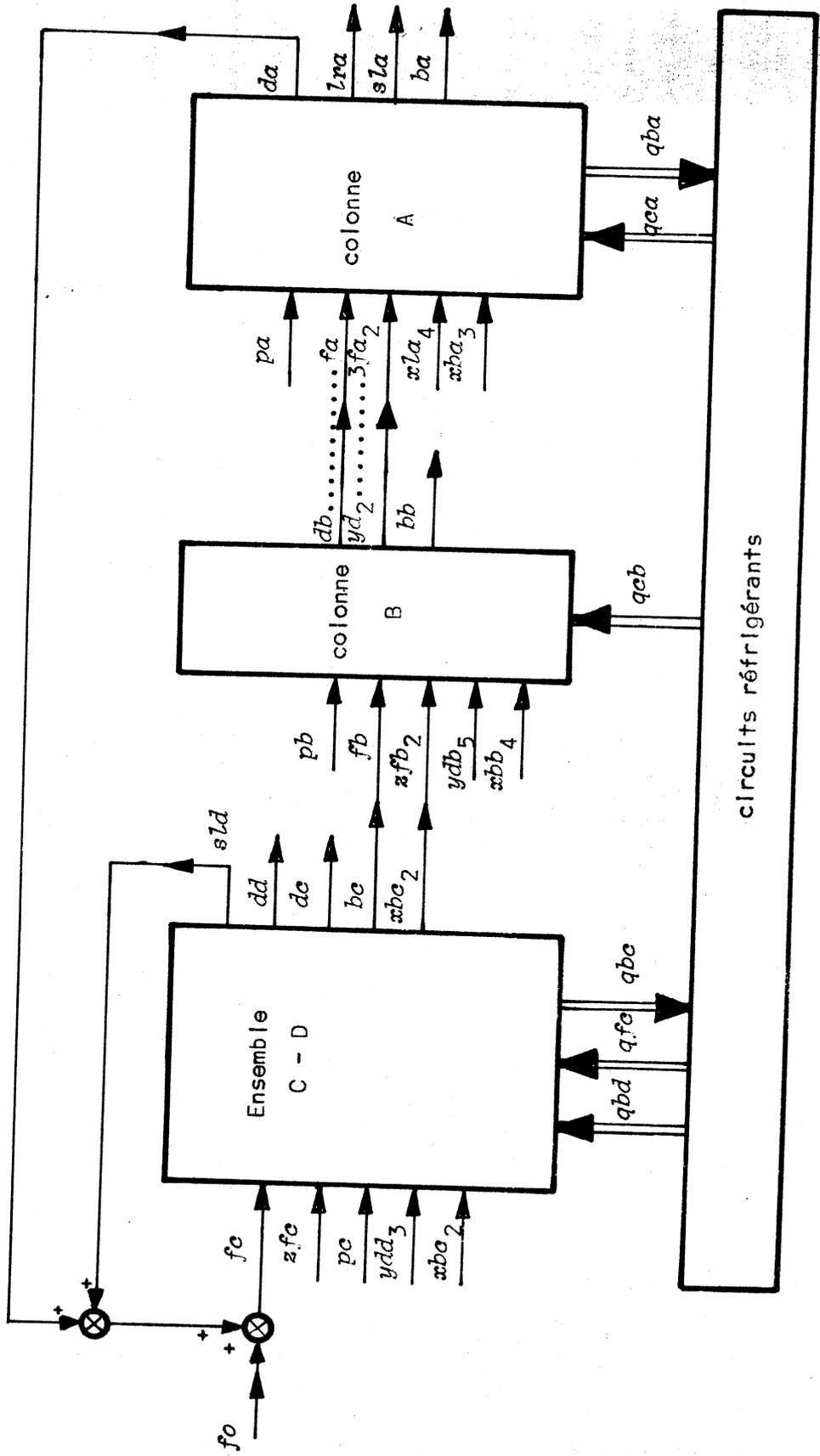


FIGURE V 4

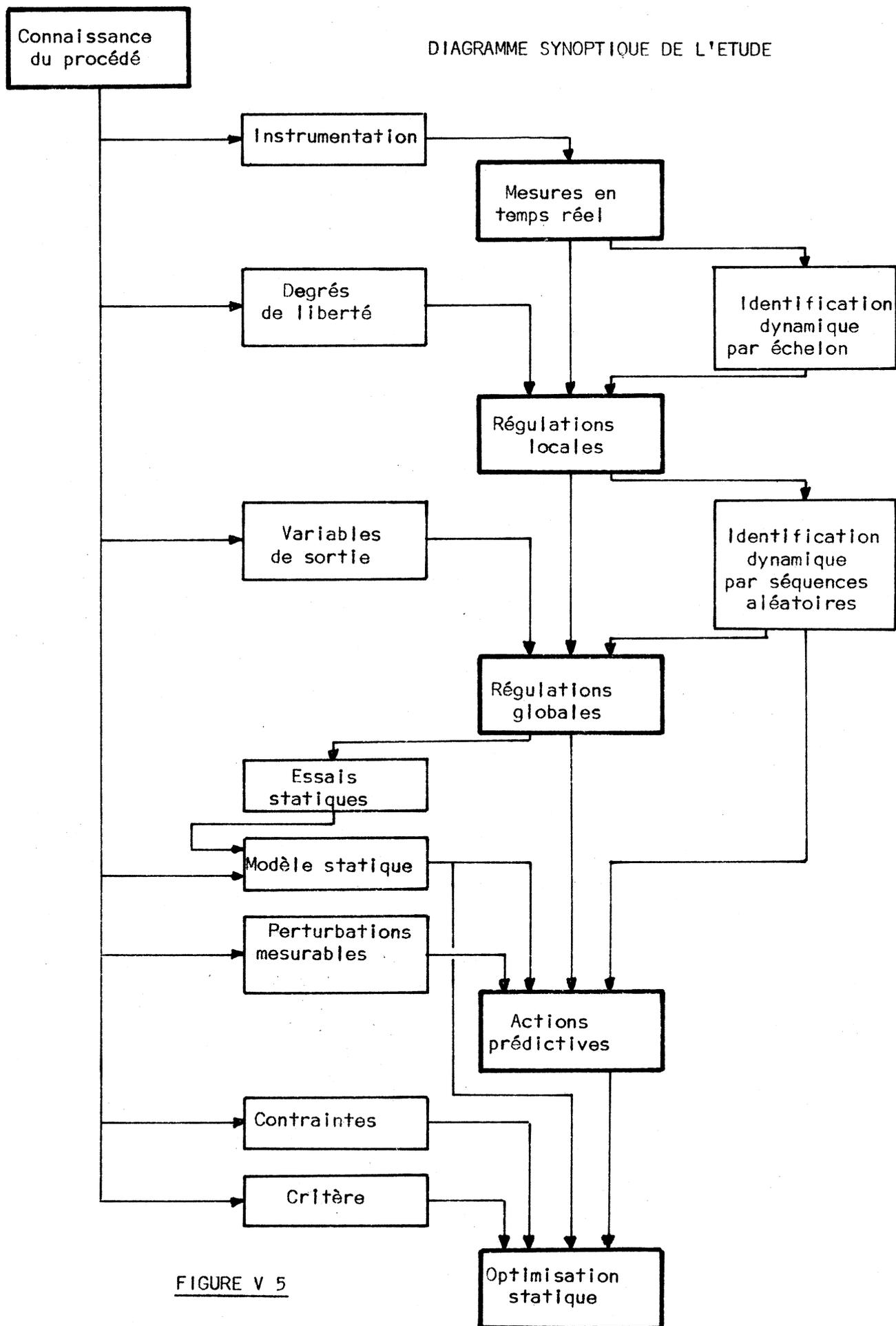


FIGURE V 5

EFFICACITES DE LA COLONNE T 1 (PREMIERES VALEURS)

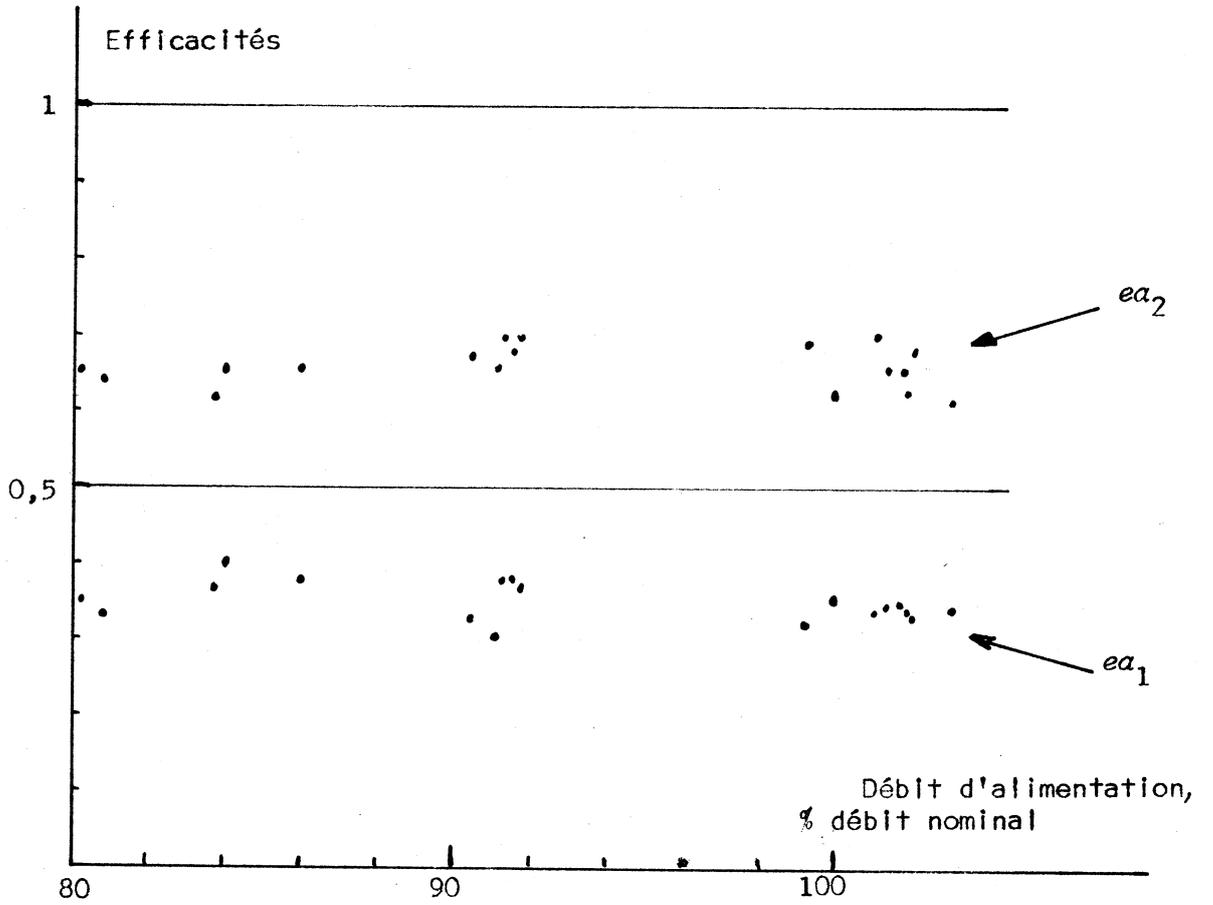


FIGURE V 6

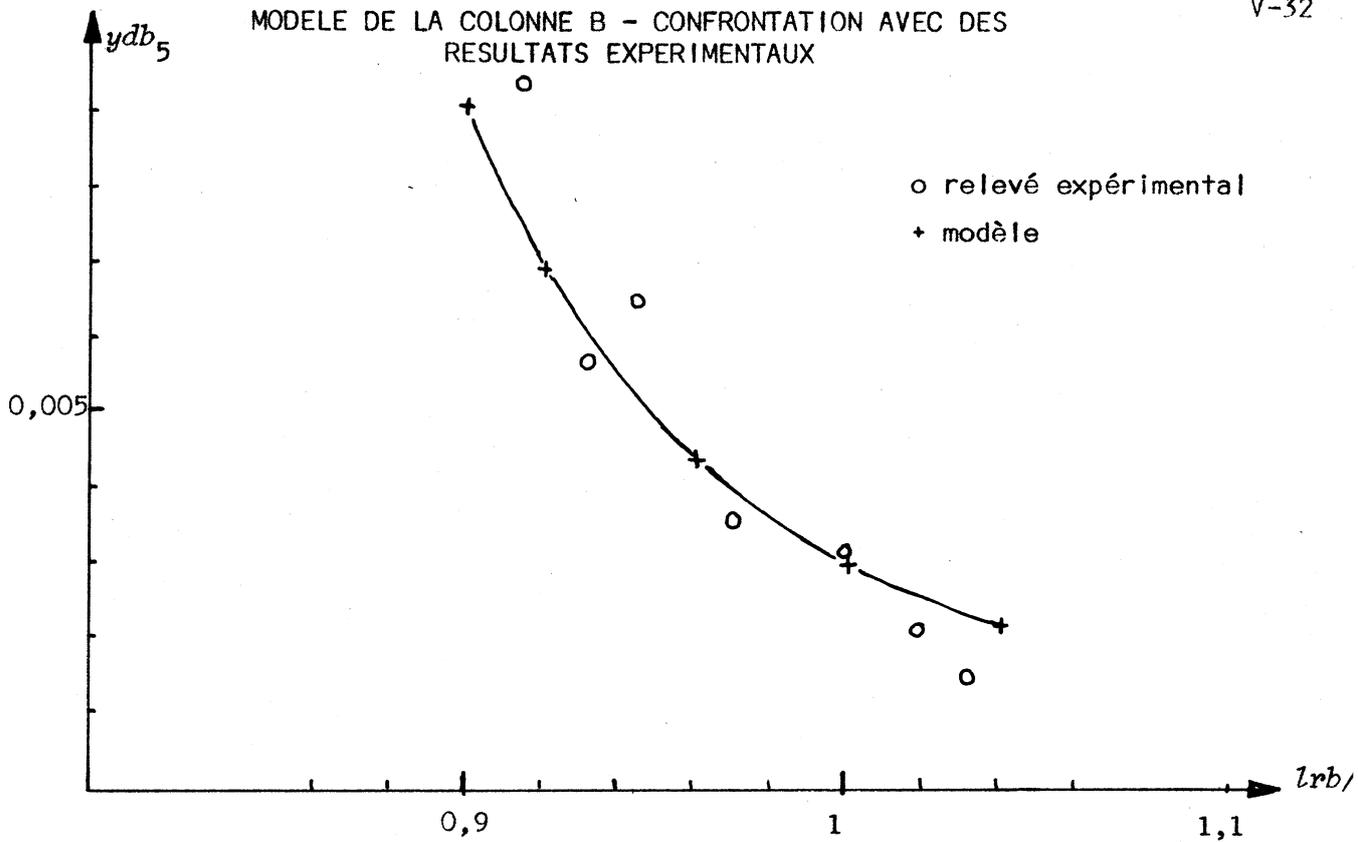


FIGURE V 7

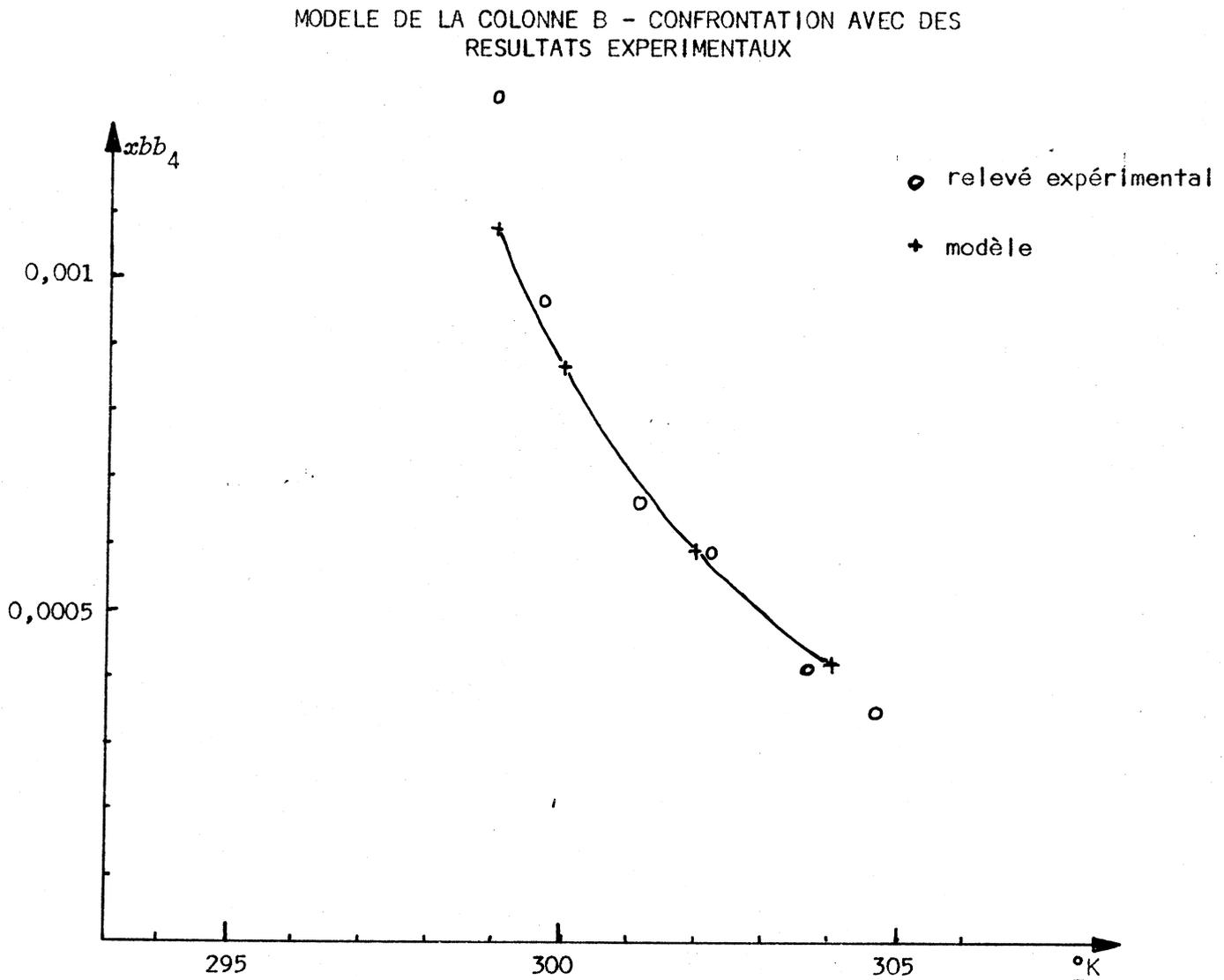


FIGURE V 8

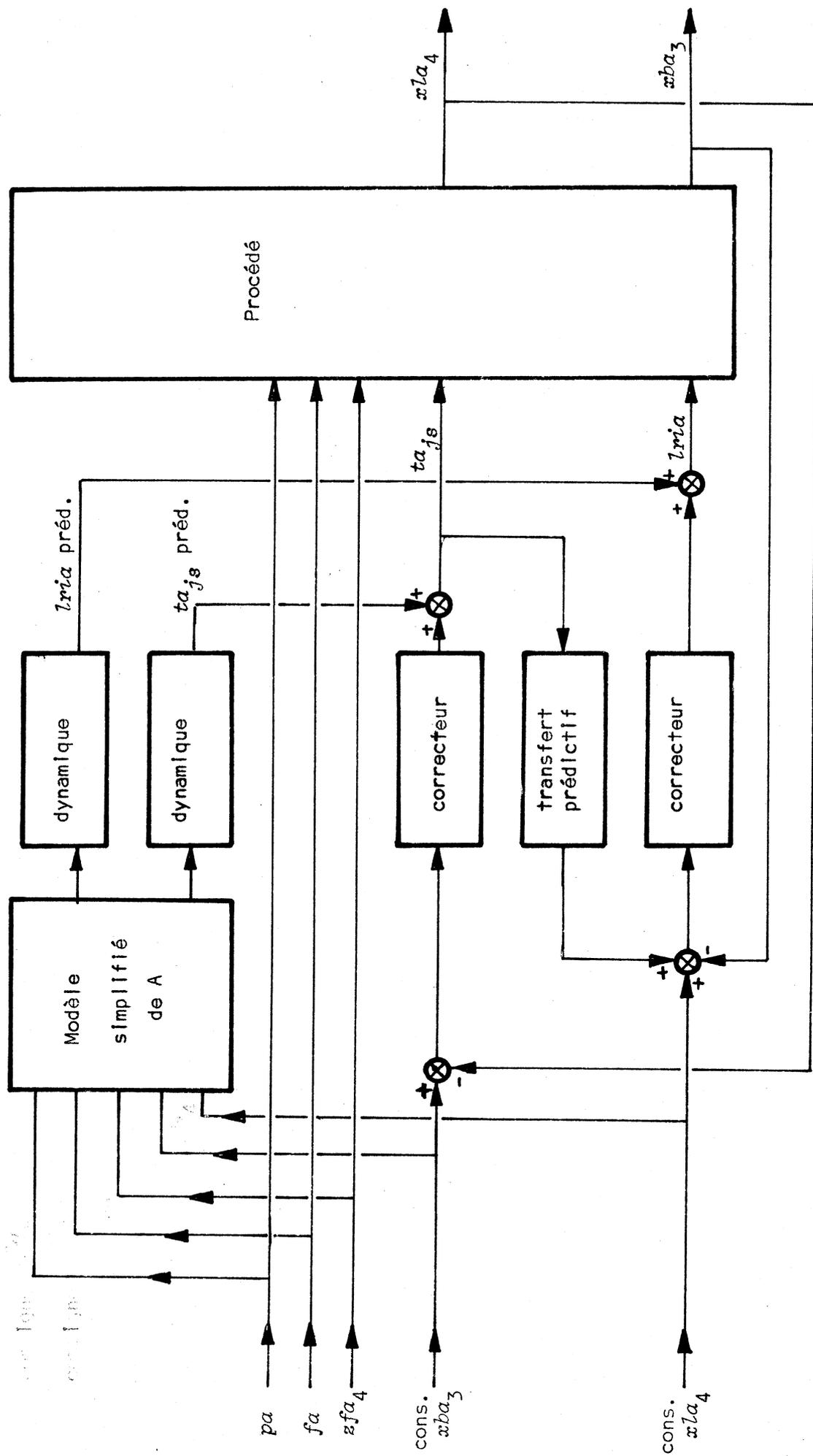


FIGURE V 9

MODELE DE A : EVOLUTION DE lra pour $fa = 1,03$. fa_{\max} actuel

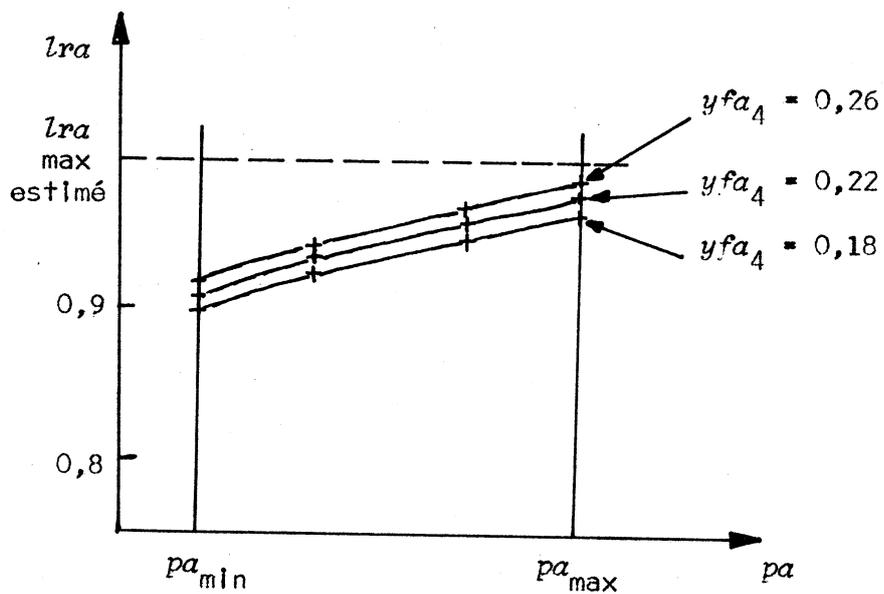


FIGURE V 10

MODELE DE B : EVOLUTION DE qcb/fb

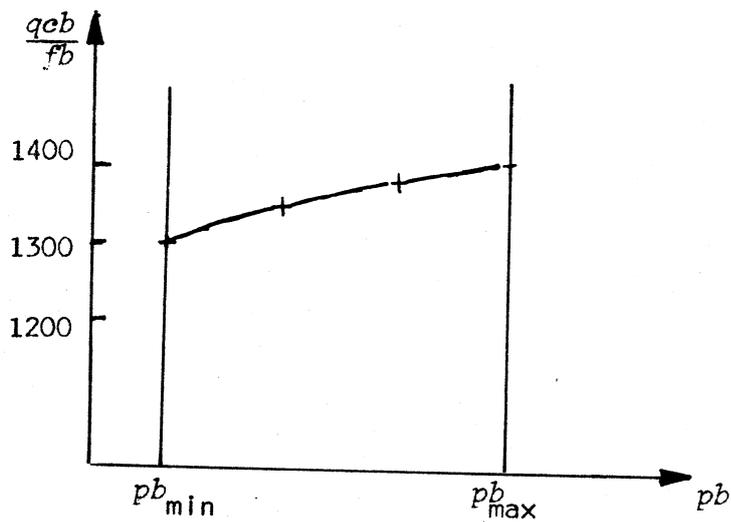


FIGURE V 11

CONCLUSION

Les problèmes rencontrés au cours d'une étude industrielle d'automatisation nous ont conduit à définir les critères auxquels doit satisfaire une méthode de résolution du système formant le modèle mathématique statique d'une colonne de distillation.

La méthode que nous avons proposée dans ce travail remplit totalement les conditions requises ; les applications présentées mettent par ailleurs en évidence, et ses qualités et l'étendue de son champ d'application.

On notera qu'actuellement, cette méthode est déjà exploitée par des industriels pour la résolution de problèmes de conception d'unités et de systèmes de commande.

Remarquons que le problème traité est celui du calcul de l'état d'une colonne lorsque le nombre de variables dont la valeur est fixée est égal au nombre de degrés de liberté. On peut cependant envisager des problèmes où cette relation n'est pas vérifiée :

- Au cours de l'identification, le nombre de variables mesurées peut être plus grand, et la valeur retenue pour les paramètres est alors celle qui rend minimal un critère d'erreur.
- Au cours de l'optimisation le nombre de variables indépendantes est au contraire inférieur et c'est alors un critère économique qui doit être rendu minimal (ou maximal).

Dans les deux cas le problème est celui de la minimisation d'une fonction scalaire de plusieurs variables (critère) en présence de contraintes d'égalité (équation du modèle). La difficulté due au nombre élevé d'équations restant inchangée, l'algorithme de réduction proposé garde tout son intérêt pour résoudre ce problème.

Ceci constitue un développement de la méthode décrite qui pourrait s'avérer très intéressant, par sa transformation en un algorithme intégré d'identification ou d'optimisation.

De même il n'est pas sans intérêt de remarquer que le travail présenté ici a été effectué dans un domaine déjà très largement étudié. Ceci permet de mieux préciser ce qu'il apporte, et qui se situe à la jonction de deux disciplines : L'Automatique et le Génie Chimique.

L'automaticien, pour concevoir la commande d'un procédé, a besoin d'une connaissance quantitative précise de son fonctionnement ; il fait alors nécessairement appel aux techniques dont dispose le spécialiste de la seconde discipline. Par contre, même si celui-ci fournit une solution satisfaisante au problème de connaissance posé, l'outil correspondant (méthodes de calcul par exemple) doit nécessairement être façonné selon l'emploi qu'en fera l'automaticien. C'est ce qui a été fait ici pour les modèles de colonne.

La portée de ce travail dépasse ainsi le cadre strict de la distillation ; en effet le problème peut se poser en termes analogues chaque fois que le spécialiste de l'Automatique doit faire appel aux connaissances et aux techniques des disciplines relatives au système commandé (Génie Chimique, Economie, Ecologie, etc...).

A N N E X E

METHODE DE MULLER POUR LA RESOLUTION D'UNE EQUATION

NON-LINEAIRE

Nous décrivons ici la méthode de Muller, dans la version proposée par Kristiansen [M13]. Soit l'équation non-linéaire :

$$(A-1) \quad \phi(x) = 0$$

Les hypothèses de départ de l'algorithme sont les suivantes :

- On connaît deux valeurs x_i et x_s telles que :

$$(A-2) \quad f_i = \phi(x_i) < 0$$

$$(A-3) \quad f_s = \phi(x_s) < 0$$

- La fonction ϕ est continue en x sur tout l'intervalle $\{x_i, x_s\}$

- L'équation (A-1) possède une solution unique dans cet intervalle.

La procédure itérative est alors la suivante :

1 - Bissection de l'intervalle et calcul de la valeur correspondante de ϕ :

$$(A-4) \quad x_m = \frac{x_i + x_s}{2}$$

$$(A-5) \quad f_m = \phi(x_m)$$

2 - Test : $|f_m| < \epsilon$? (la valeur de ϵ est préfixée) oui : fin du calcul, non : continuer en 3.

3 - Test : $\left[\frac{f_m - f_i}{f_s - f_i} \leq \frac{x_m - x_i}{x_s - x_i} \text{ et } \frac{f_s - f_m}{f_s - f_i} \leq \frac{x_s - x_m}{x_s - x_i} \right]$? oui : aller en 5
non : continuer en 1

4 - Test : $f_m > 0$? oui : affecter à x_s et f_s les valeurs de x_m et f_m , non : affecter à x_i et f_i les valeurs de x_m et f_m , et dans les deux cas retourner en 1.

5 - Interpolation parabolique inverse sur les trois points d'abscissés x_i, x_m, x_s . L'intersection de la parabole avec l'axe des x fournit une estimation de la solution, et la valeur correspondante de ϕ est calculée :

$$(A-6) \quad x_c = \frac{f_i \cdot f_m \cdot x_s \cdot (f_i - f_m) + f_m \cdot f_s \cdot x_i \cdot (f_m - f_s) + f_s \cdot f_i \cdot x_m \cdot (f_s - f_i)}{(f_m - f_i) \cdot (f_s - f_m) \cdot (f_i - f_s)}$$

$$(A-7) \quad f_c = \phi(x_c)$$

6 - Test : $f_c > 0$? oui : affecter à x_s et f_s les valeurs de x_m et f_m , non : affecter à x_i et f_i les valeurs de x_m et f_m , et dans les deux cas affecter ensuite à x_m et f_m les valeurs de x_c et f_c .

7 - Reprendre le calcul en 2.

Cette procédure est d'une fiabilité totale : le test de l'étape 3 garantit que, lorsque l'interpolation parabolique est employée, l'estimation x_c obtenue est située dans un intervalle ($\{x_i, x_m\}$ ou $\{x_m, x_s\}$ selon les cas) qui contient nécessairement la solution. La longueur de cet intervalle est réduite à chaque itération et converge vers zéro.

Nous avons employé cette procédure sous la forme décrite en particulier pour la détermination de la fraction vaporisée f_v dans les calculs d'état d'un mélange comportant deux phases, car en effet, nous disposons, dans cette boucle, des limites haute et basse de f_v .

Par contre, l'application stricte de l'algorithme conduirait à une perte de temps dans d'autres cas, comme par exemple celui du calcul du débit liquide z_{j-1} dans le paragraphe III-3-1-a, où on dispose d'une bonne estimation initiale de la solution, et où la non-linéarité de l'équation n'est pas très importante. L'approximation parabolique est alors systématiquement employée dès la troisième itération, que ce soit en interpolation ou en extrapolation, et non seulement en interpolation comme dans la configuration de base. De plus, les deux premières itérations, effectuées successivement par itération directe et par la méthode de Newton, contribuent elles aussi à une évolution en direction de la solution.

Cette façon de procéder ne présente pas la même sécurité que la procédure de base, mais permet par contre, de gagner un temps appréciable dans les cas simples.

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

Les différents articles et ouvrages que nous citons en référence dans cette partie ont été classés selon leur centre d'intérêt par rapport à notre travail. On trouve successivement les trois rubriques suivantes :

- B.1. référence D : Modèles mathématiques statiques des colonnes de distillation.
- B.2. référence T : Modèles des propriétés thermodynamiques des mélanges distillés.
- B.3. référence M : Méthodes de résolution des systèmes d'équations non linéaires.
Méthodes de minimisation des fonctions de plusieurs variables.

Cependant, nous ne prétendons pas établir une revue complète des publications dans ce domaine. Nous n'avons mentionné que les articles et ouvrages qui nous ont paru les plus significatifs, et qui nous ont été les plus utiles. Un commentaire accompagne chaque référence, destiné à en mettre en valeur l'intérêt spécifique.

B.1. MODELES MATHEMATIQUES STATIQUES DES COLONNES

DE DISTILLATION

- {D1} AMUNDSON, N.R. ; POTINEN, A.J. - Multicomponent distillation on a large digital computer.
 Ind. Eng. Chem., vol.50, n°5, 1958, p.730
Les auteurs proposent une méthode matricielle pour la résolution du système linéaire obtenu dans une des phases de l'algorithme de Thiele Geddes. Cette formulation sera reprise en particulier par Sargent et col, Weng et col, ainsi que de nombreux auteurs.
- {D2} BALL, W.E. - Computer programs for distillation.
 44th A.I.Ch.E. National Meeting, New-Orléans,
 Février 1961
Dans cet article, une modification est apportée à la méthode de relaxation proposée par Rose et Col. Le temps de calcul s'en trouve sensiblement réduit.
- {D3} BONNER, J.S. - Solution of multicomponent distillation problems on a stored-programm computer.
 Am. Petr. Indt. Quaterly, Div. of Refining, vol.36,
 n°3, 1956, p.238
Dans cet article la méthode dite du "mismatch" est proposée conjointement à celle de Lewis-Matheson pour résoudre le problème de convergence.
- {D4} BORNARD, G. - Modèle mathématique d'une colonne de distillation.
 Note aux compte-rendus, Acad. Sciences, Paris, vol.272,
 Mai 1971, p. 1338
Une nouvelle méthode de résolution du système d'équations formant le modèle statique d'une colonne de distillation est proposée. Elle forme la base du travail présenté ici.
- {D5} BORNARD, G., MENENDEZ, A. - Identification de colonnes de distillation dans un steam-cracking, en vue de leur commande par calculateur numérique.
 Journée A.F.C.E.T., "Les modèles et leur emploi",
 Paris, Avril 1970
Une partie de cet article est consacrée à l'identification d'une colonne industrielle à l'aide d'une réalisation particulière de la méthode proposée ici.

- {D6} BOYNTON, G.W. - Iteration solves distillation.
 Hydrocarbon Processing, vol 49, 1970, p.153
L'auteur propose une méthode associant la méthode de Newton-Raphson à la procédure de Thiele-Geddes pour résoudre le problème de convergence. Une formulation du type "Inner loop" est employée.
- {D7} BURNINGHAM, D.W. ; OTTO, F.D. - Which computer design for absorbers.
 Hydrocarbon Processing, vol.46, 1967, p.163
Cet article consiste en une comparaison de différentes versions de la méthode de Thiele et Geddes dans le cas de colonnes d'absorption.
- {D8} COCHET, D. ; MENENDEZ, A. ; BORNARD, G. - Rapport final d'activité du contrat D.G.R.S.T. n° 68-01-311
Ce rapport décrit l'ensemble de l'étude d'automatisation d'un steam-cracking dont certains résultats partiels sont décrits dans le chapitre V de la présente thèse.
- {D9} DAVIS, P.C. ; SOBEL, B.A. - Absorber-Stripper calculations with a digital computer.
 National Meeting A.I.Ch.E., Tulsa, Okl., sept.1960
Les auteurs proposent une version très intéressante de la méthode de Lewis et Matheson dans laquelle les bilans matériels, enthalpiques et les équations d'équilibre sont simultanément satisfaits. C'est cette version qui est employée dans la méthode proposée.
- {D10} DONNELL, J.W. ; TURBIN, K. - Save time with systematic method for distillation calculations.
 Chem. Eng., vol.58, 1951, p.112
Dans cet article une formulation spéciale de la méthode de Thiele et Geddes est proposée, destinée à réduire le temps de calcul. C'est celle qui est en particulier utilisée par Holland et son équipe.
- {D11} DUCHATEL, R. ; SEMPE, B. ; BORNARD, G. ; MELENNEC, J.L. ; PERRET, R.
 Commande d'une colonne industrielle de superfractionnement à l'aide d'un ordinateur numérique.
 Chimie et Ind., Gen. Chim., vol. 101, n°1, p.43 et n°3, p.329, 1969
Dans cette étude l'identification d'une colonne de distillation binaire et l'emploi du modèle obtenu utilisent des algorithmes qui peuvent être considérés comme des cas particuliers de la méthode proposée.

- {D12} GOLDSTEIN, R.P. ; STANFIELD, R.S. - A flexible method for the solution of distillation design problems using the Newton-Raphson technique.

Ind. Chem. Proc. Des. Dev., vol.9, n°1, 1970, p.78

La méthode présentée dans cet article est sans doute la meilleure réalisation actuelle du type à résolution simultanée. Elle permet un choix arbitraire de la constitution du vecteur indépendant et ses performances sont améliorées par rapport à celles de la méthode de Naphtali par exemple. Elle reste cependant d'un emploi difficile.

- {D13} GREENSTADT, J. ; BARD, Y. ; MORSE, B. - Multicomponent distillation calculation on the IBM 704.

Ind. Eng. Chem., vol.50, 1958, p.1644

Les auteurs proposent l'utilisation conjointe de la méthode de Newton et de l'algorithme de Lewis-Matheson, avec résolution simultanée des équations de bilans matériel et enthalpique et des équations d'équilibre liquide-vapeur. Cette formulation est très intéressante et le vecteur d'itération obtenu est de dimension assez faible.

- {D14} HANSON, D.N. ; DUFFIN, J.H. ; SOMERVILLE, G.F. - Computation of multistage separation processes.

Reinhold Pub., New-York, 1962

Ce livre contient les algorithmes classiques de calcul des colonnes de distillation et présente l'intérêt de fournir les programmes correspondants écrits en langage FORTRAN.

- {D15} HOLLAND, C.D. - Multicomponent distillation.

Prentice Hall, Englewood Cliffs, N.J., 1963

L'auteur présente dans ce livre une excellente revue des méthodes de calcul des colonnes de distillation. Il décrit plus particulièrement le détail de diverses applications de la méthode "θ". Il traite aussi le problème des coefficients d'efficacité. Il consacre enfin une partie de son ouvrage aux modèles thermodynamiques (voir paragraphe B.2).

- {D16} HOLLAND, C.D. ; WELCH, N.E. - Steam batch distillation calculation.

Petrol. Refiner, vol.36, n°5, 1957, p.251

Dans cet article les auteurs proposent la définition d'un coefficient d'efficacité de vaporisation servant à définir la non-idéalité d'un processus de distillation.

- {D17} I.F.P. - Les méthodes de calcul sur ordinateur appliquées au raffinage et à la pétroléochimie.

Edition Technip, Paris, 1969

Ce livre contient une bonne revue des méthodes de calcul des colonnes de distillation. On y trouve en particulier une description de la méthode des "flashes successifs". Les modèles thermo dynamiques y tiennent également une large part. Il présente enfin l'intérêt de fournir des programmes rédigés en langage FORTRAN.

- {D18} JEANTET, B. - Etude du modèle mathématique statique d'une colonne à distiller un mélange à plusieurs constituants.

Thèse de Doct.-Ing., Université de Grenoble, 1968

Dans cette thèse l'auteur présente les aspects théoriques et pratiques de l'identification d'une colonne de distillation. Les méthodes du modèle, pour la formulation du problème, de Holland pour le calcul, et de Box pour la définition du plan d'expérience, y sont en particulier développées.

- {D19} LEWIS, W.K. ; MATHESON, G.L. - Studies in distillation - design of rectifying columns for natural en refinery gasoline.

Ind. Ing. Chem., vol.24, 1932, p.494

Les auteurs proposent dans cet article une méthode de calcul plateau par plateau qui portera leurs noms, et inspirera de nombreux auteurs qui en élaboreront diverses variantes. La méthode présentée ici utilise un algorithme de ce type.

- {D20} LYSTER, W.N. ; SULLIVAN, S.L. ; BILLINGLEY, D.S. ; HOLLAND, C.D.

Figure distillation this new way : part 1 - New convergence method will trandle many cases.

Petr. Refiner, vol.38, n°6, 1959, p.221

C'est dans cet article qu'apparait la "méthode θ " de calcul des colonnes de distillation. Cette méthode est simple et rapide, et a été très employée.

- {D21} MENENDEZ, A. - Identification de la réponse impulsionnelle d'un système par intercorrélation au moyen de séquences binaires pseudo-aléatoires.

Thèse de Doct.-Ing., Université de Grenoble, 1970

La méthode d'identification dynamique décrite dans cette thèse a été utilisée dans l'étude d'automatisation mentionnée dans le chapitre V du présent travail.

{D22} MURPHREE, E.V. - Rectifying columns calculations.

Ind. Ing. Chem., vol.17, 1925, p.747

Dans cet article, l'auteur propose une définition d'efficacité des plateaux d'une colonne. Cette définition est sans doute une des plus employées. C'est celle qui apparait dans les équations du chapitre I du présent travail.

{D23} NAPHTALI, L.M.

56th AIChE meeting, San Francisco, Mai 1965

Dans cet article l'auteur propose une des premières méthodes de résolution simultanée. Cette méthode sera reprise et rendue un peu plus opérationnelle par Goldstein et Standfield en particulier.

{D24} PEISER, A.M. - Better computations of multicomponent systems.

Chem. Eng., vol.67, 1960, p.129

L'auteur propose l'application de la méthode Θ à l'algorithme de Lewis-Matheson sous une forme particulière faisant intervenir des racines carrées.

{D25} PERRET, R. ; BORNARD, G - Static model of a distillation column

Int. Conference I.E.E.E., Mexico, 1971

Cet article présente le principe général de la méthode proposée ici, ainsi que son application à l'identification de la colonne A du chapitre V.

{D26} ROSE, A. ; SWEENEY, R.F. ; SHRODT, V.N. - Continuous distillation calculation by relaxation method.

Ind. Eng. Chem., vol.50, 1958, p.737

Les auteurs proposent une nouvelle méthode (méthode de "relaxation") pour le calcul d'une colonne de distillation. Cette méthode très sûre, mais aussi très lente, sera améliorée en particulier par BALL.

{D27} SARGENT, R.W. ; MURTAGH, B.A. - The design of plate distillation columns for multicomponent mixtures.

Trans. Inst. Chem. Eng., vol.47, 1969, p.85

Dans cet article est présentée une variante de la méthode de Thiele Geddes utilisant la technique de l'"inner loop". Il est intéressant de remarquer que les coefficients d'efficacité de Murphree (matériels et thermiques) sont inclus dans la formulation matricielle du problème.

- {D28} THIELE, E.W. ; GEDDES, R. - Computation of distillation apparatus for hydrocarbon mixtures.

Ind. Eng. Chem., vol.25, 1933, p.289

Les auteurs proposent une méthode de calcul des colonnes de distillation qui comme celle de Lewis Matheson, sera exploitée par de nombreux auteurs qui en proposeront diverses versions, dont une des plus utilisée a sans doute été celle de Holland.

- {D29} TOMICH, J.F. - A new simulation method for equilibrium stage processes.

A.I.Ch.E. Journal, vol.16, n°2, 1970, p.229

La méthode proposée dans cet article allie la méthode de Newton à l'algorithme de Thiele Geddes. La méthode de Broyden évite l'inversion d'une matrice de grande dimension à chaque itération.

- {D30} VAN WINKLE - Distillation

Mc. Graw Hill, 1967

Ce livre est une revue des méthodes de calcul des colonnes de distillation, ordonnée par rapport aux divers types de problèmes de distillation à résoudre, considérés plutôt d'un point de vue génie chimique. Les modèles thermodynamiques sont aussi traités dans cet ouvrage.

- {D31} WANG, J.C. ; HENKE, G.E. - Tridiagonal matrix for distillation.

Hydrocarbon proc., vol.45, n°8, 1966, p.155

Les auteurs reprennent la méthode de résolution matricielle du système linéaire apparaissant dans la méthode de Thiele Geddes et en proposent une formulation plus condensée que celle proposée par Amundson et Col.

- {D32} WATERMAN, W.N. ; FRAZIER, J.P. - Distillation program generates its own data.

Hydro. Proces. Petr. Ref., vol.44, n°9, 1965, p.155

Cet article est une revue des méthodes de calcul. La programmation des quatre grandes classes de méthodes (voir chapitre II du présent travail) a été effectuée et des tests sont présentés.

B.2. MODELES DES PROPRIETES THERMODYNAMIQUES DES MELANGES

ETUDIES

- {T1} BENEDICT, M. ; WEBB, G.B. ; RUBIN, L.C. - An empirical equation for thermodynamic properties of hydrocarbons and their mixtures : Part II - mixtures of méthane, éthane, propane and n-butane. J.Chem. Phys., vol.10, 1942, p.747
Dans cet article, les auteurs étendent la validité de l'équation présentée dans un article précédent (J.Chem. Phys., vol.8, 1940, p.334) aux mélanges d'hydrocarbures légers. D'autres auteurs, en particulier Orye amélioreront cette équation et en élargiront le champ d'application.
- {T2} CHAO, K.C. ; SEADER, J.D. - A general correlation of vapor-liquid equilibria in hydrocarbon mixtures. A.I.Ch.E. Journal, vol.7, n°4, 1961, p.598
Une méthode complète de calcul des coefficients d'équilibre est proposée. Elle utilise l'équation d'état de Redlich-Kwong et la loi des états correspondants. La valeur numérique des coefficients est donnée pour un ensemble d'hydrocarbures légers. Cette méthode semble être très employée du fait de sa simplicité de mise en oeuvre.
- {T3} CHUEH, P.L. ; PRAUSNITZ, J.M. - Computer calculations for high pressure vapor-liquid equilibria. Prentice Hall Int. Ser., Englewood Cliffs, N.J.1968
La méthode de calcul des coefficients d'équilibre proposée utilise l'équation d'état de Redlich Kwong ainsi que celle de Van Laar modifiée. Les interactions entre constituants sont envisagées, ce qui fait que cette méthode est d'une mise en oeuvre difficile.
- {T4} DE PRIESTER, C.L. - Light hydrocarbon vapor-liquid distribution coefficients. Pressure Temperature Composition Charts and pressure Temperature nomographs. Chem. Eng. Prog. Symp. Ser., vol.49, n°7, 1953, p.1
La loi des états correspondants est utilisée pour la détermination de fugacités. Des corrélations sont fournies, permettant d'effectuer le calcul des coefficients d'équilibre.

- {T5} EDMISTER, W.C. ; RUBY, C.L. - Generalized activity coefficients in hydrocarbons:

Chem. Eng. Progr., vol.51, n°2, 1955, p.95

Une corrélation générale donnant les coefficients d'activité en fonction des températures et pression réduites, est obtenue pour 12 hydrocarbures légers. Cette corrélation est applicable aux parafines et oléfines et extensible à d'autres corps.

- {T6} GRAYSON, H.G. ; STREED, J. - Vapor liquid equilibria for high temperature, high pressure hydrogen-hydrocarbon systems.

Congrès mondial du pétrole, section 7, pag.20,

Juin 1963

Les auteurs reprennent la méthode de Chao et Seader dont ils élargissent le domaine de validité en pression et température, et donnent la valeur des paramètres pour de nouveaux corps (hydrogène en particulier).

- {T7} HADDEN, S.T. - Convergence pressure in hydrocarbon vapor-liquid equilibria.

Chem. Eng. Prog. Symp. Ser., vol.49, n°7, 1953,
p.53

La théorie de la pression de convergence est présentée pour les mélanges multicomposants et le cas où la température de l'équilibre est inférieure à la température critique, est plus particulièrement étudié.

- {T8} HOLLAND, C.D. - Multicomponent distillation.

Prentice Hall, Englewood Cliffs, N.J., 1963

Ce livre comprend en plus de ceux réservés aux modèles de colonne, deux chapitres consacrés à la représentation des propriétés thermodynamiques des mélanges. Ils comportent une large revue des méthodes disponibles et une importante bibliographie.

- {T9} HOUGEN, O.A. ; WATSON, K.M. ; RAGATZ, R.A. - Chemical principles
Part II : Thermodynamics.

John Wiley and Sons, New York, 1959

Ce livre constitue une très bonne base pour l'étude des propriétés thermodynamiques des corps purs et des mélanges. Après d'importants rappels thermodynamiques, il présente de nombreuses méthodes de calcul pratique des enthalpies et des coefficients d'équilibre liquide-vapeur. Remarquons cependant que diverses méthodes sont apparues après sa date de publication.

{T10} HOWERTON, M.T. - Engineering thermodynamics.

Van Nostrand Comp., Princeton, N.J., 1962

Ce livre présente les différentes approches des principes de la thermodynamique, ainsi que leur application à la caractérisation des équilibres thermodynamiques multiphases, en particulier des équilibres liquide-vapeur. Il fournit aussi quelques bases au calcul pratique des diverses fonctions d'état mises en jeu.

{T11} KOSKAS, A. - Méthodes de calcul des coefficients d'équilibre des hydrocarbures.

Com. privée, Institut Français du Pétrole, 1970

Une revue des méthodes de calcul des équilibres liquide-vapeur est présentée. On y trouve la description des méthodes de la pression de convergence, de Chao et Seader, B.W.R., Chueh et Prausnitz et de Zudkevitch, ainsi que les principaux avantages et inconvénients de chacune d'elles.

{T12} LENOIR, J.M. ; WHITE, G.A. - Predicting convergence pressure.

Petr. Refiner, vol.37, n°3, 1958, p.173

Une méthode graphique est proposée pour la prédiction de la pression de convergence pour une large gamme d'hydrocarbures.

{T13} LEWIS, W.K. ; KAY, W.C. - Fugacity of various hydrocarbon mixtures above their vapor pressure and below their critical temperature.

Oil and Gas J., vol.32, n°45, 1934, p.40

Les fugacités sont calculées à partir de la loi des états correspondants. Le cas des états hypothétiques est plus spécialement traité, et une méthode d'extrapolation est proposée.

{T14} MAXWELL, J.B. - Data book on hydrocarbons.

Van Nostrand Comp., New York, 1951

Ce livre est un classique en ce qui concerne la détermination des enthalpies des hydrocarbures ou des mélanges d'hydrocarbures. De très nombreuses abaques y sont présentées.

{T15} N.G.A.A. - Equilibrium ratio data book.

Tulsa, Okl., 1957

De très nombreuses données sont présentées dans cet ouvrage concernant principalement les hydrocarbures. Elles sont relatives au calcul des coefficients d'équilibre liquide-vapeur et sont généralement fournies sous forme de tables et d'abaques.

{T16} N.G.S.M.A. - Engineering data book.

Tulsa, Okl., 1957

Ce livre, comme le précédent, rassemble de nombreuses données sur les caractéristiques thermodynamiques des hydrocarbures, présentées sous forme de tables et d'abaques.

{T17} ORYE, M.J. - Prediction and correlation of phase equilibria and thermal properties with the B.W.R. equation of state.

Ind. Eng. Chem. Proc. Dev., vol.8, n°4, 1969

L'auteur reprend la méthode de B.W.R. pour le calcul des coefficients d'équilibre liquide-vapeur, y fait apparaître un paramètre supplémentaire qui permet de tenir compte d'interactions dans les mélanges, et y inclut le calcul des enthalpies. C'est cette méthode que nous avons employée dans nos applications.

{T18} REDLICH, O.A. ; KISTER, A.T. - Algebraic representation of thermodynamic properties and classification of solutions.

Ind. Eng. Chem., vol.40, 1948, p.345

La représentation algébrique proposée dans cette méthode (basée sur la théorie statistique) permet la détermination des coefficients d'activité dans le cas de mélanges multicomposants.

{T19} REDLICH, O.A. ; KWONG, J.N.S. - The thermodynamics of solutions - V : An equation of state-fugacities of gaseous solutions.

Chem. Rev., vol.44, 1949, p.233

L'aquation d'état proposée dans cet article est employée dans de nombreuses méthodes de calcul des équilibres liquide-vapeur, le plus souvent pour la détermination des caractéristiques de la phase vapeur.

- {T20} SOUFRTD, M. ; SELHEIMER, W.W. ; BROWN, G.G. - Equilibria between liquid and vapor solutions of parafin hydrocarbons.
Ind. Eng. Chem., vol.24, 1932, p.517

Les coefficients d'équilibre sont calculés par utilisation de la loi des états correspondants. Une méthode d'extrapolation est proposée pour traiter le cas des états hypothétiques.

- {T21} WATERMAN, W.W. ; FRAZIER, J.P. - Distillation program generates its own data.

Hydrocarb. process. Petr. Ref., vol44, n°9, 1965,
p.155

Dans les programmes proposés, les équilibres liquide-vapeur sont calculés à l'aide de la méthode de Chao et Seader. L'auteur propose un calcul des enthalpies cohérent avec cette méthode.

- {T22} WINN, F.W. - Simplified nomographic presentation : hydrocarbon vapor-liquid equilibria.

Chem. Eng. Prog. Symp. Ser., vol.48, n°2, 1952,
p.121

Dans cet article, l'auteur élargit une méthode proposée par Hadden (1948), et fournit une présentation nomographique permettant le calcul des coefficients d'équilibre d'une large gamme de corps.

- {T23} WOHL, K. - Thermodynamic evolution of binary and ternary liquid-systems.

Trans. Am. Inst. Chem. Eng., vol.42, 1946, p.215

La méthode présentée dans cet article, issue de la théorie statistique de la thermodynamique, permet de déterminer une loi de variation des coefficients d'activité en phase liquide. Sa formulation est très générale.

B.3. METHODES DE RESOLUTION DES SYSTEMES D'EQUATIONS

NON-LINEAIRES - METHODES DE MINIMISATION DES

FONCTIONS DE PLUSIEURS VARIABLES.

- {M1} BARNES, J.G.P. - An algorithm for solving non-linear equations based on the secant method.
 Comput. J., vol.8, 1965, p.66
La méthode proposée dans cet article conduit, après $n+1$ itération, à celle de la sécante généralisée. Les premières itérations nécessitent l'emploi d'un processus d'orthogonalisation.
- {M2} BOUDAREL, R. ; DELMAS, J. ; GUICHET, P. - Commande optimale des processus - tome 2 : Programmation non-linéaire et ses applications.
 Dunod, Paris 1968
Ce livre d'intérêt général traite le problème de la minimisation d'une fonction de plusieurs variables dans diverses conditions. On y trouve en particulier un chapitre consacré à la comparaison des vitesses de convergence des méthodes du premier et du second ordre.
- {M3} BROYDEN, G.G. - A class of methods for solving nonlinear simultaneous equations.
 Comput. J., vol.19, 1965, p.577
Dans cet article l'auteur présente une méthode de correction du Jacobien inverse à chaque itération sans évaluation supplémentaire de la fonction ϕ .
- {M4} BROYDEN, C.G. - Quasi-Newton methods and their application to function minimization.
 Math. of Comp., vol.21, 1967, p.368
Une formulation générale est proposée permettant de décrire une large classe de méthodes de correction du Jacobien inverse à chaque itération. Une étude sur leur convergence y est présentée.

- {M5} BROYDEN, C.G. - A new method of solving nonlinear simultaneous equations.
 Comput.J., vol.12, 1969, p.94
Dans cet article l'auteur propose d'appliquer la procédure qu'il a définie dans un précédent article (M.3) dans le cadre de la méthode de Davidenko. Nous utilisons cette approche dans le travail présenté ici.
- {M6} DAVIDENKO, D.F. - A new method of numerical solution of systems of non linear equations.
 Doklady Akad. Nauk. S.S.S.R., vol.88, 1953, P.601
L'auteur propose une nouvelle méthode de résolution faisant intervenir un paramètre variable. Le problème initial est remplacé par une suite de problèmes plus simples. Cette méthode est intéressante quand la première estimation dont on dispose est très éloignée de la solution.
- {M7} DAVIDON, W.C. - Variable metric methods for minimization.
 A.E.C. Research Dev., Report ANL - 5990, 1959
La méthode proposée par l'auteur permet de corriger le Hessien inverse dans un problème de minimisation sans évaluation supplémentaire de la fonction. Elle semble avoir été largement employée.
- {M8} DEIST, F.H. ; SEFOR, L. - Solution of systems of non linear equations by parameter variations.
 Comput.J., vol.10, 1967, p.78
Les auteurs reprennent le principe de la méthode de Davidenko pour en donner une réalisation plus performante dans certaines conditions.
- {M9} FLETCHER, R. - Functional minimization without evaluating derivatives - a review.
 Comput.J., vol.8, 1965, p.33
Les performances des méthodes de minimisation ne faisant pas intervenir la connaissance des dérivées partielles sont comparées, notamment en ce qui concerne trois types particuliers récemment développés (Smith, Powell, Davies-Swann-Campsey). Un ensemble de fonctions de test est proposé à cette occasion.

{M10} GASTINEL, N. - Analyse numérique linéaire.

Hermann, Paris, 1966

Ce livre, d'intérêt général, traite, entre autres sujets, de la résolution des systèmes linéaires par des méthodes itératives. Les algorithmes de la plus profonde descente et du gradient conjugué y sont en particulier décrits.

{M11} GREENSTADT, J. - On the relative efficiency of gradient methods.

Math. of comp., vol.21, 1967, p.360

L'auteur propose un critère de mesure d'efficacité relative d'une méthode de minimisation, puis compare les méthodes du gradient et de Newton. Il envisage de plus, le cas où cette dernière étant employée, le Hessien n'est pas une matrice définie positive.

{M12} HOUSEHOLDER, A.S. - Principles of numerical analysis.

Mac-Graw Hill, New-York, 1953

Ce livre d'intérêt général donne la définition et les propriétés de base de diverses méthodes utilisées en analyse numérique en particulier des méthodes du gradient et de Newton.

{M13} KRISTIANSEN, G.K. - Zero of an arbitrary function.

B.I.T., vol.3, 1963, p.205

Cet article décrit un algorithme de résolution d'une équation quelconque utilisant une interpolation parabolique inverse, : connu sous le nom de méthode de Muller.

{M14} MEYER, G.H. - On solving nonlinear equations with a one-parameter operator imbedding.

S.I.A.M. Journal Num. Anal., vol.5, 1968, p.739

L'auteur traite des méthodes de résolution à variation de paramètre. Un important effort de formalisation est fourni dans cet article.

{M15} ROSEN, E.M. - A review of quasi Newton methods in nonlinear equations solving and unconstrained optimization.

Proc. 2st Nat. Conf. A.C.M., Thomson Book Co.,
Washington D.C., vol.37, 1966

Cet article est une revue des méthodes utilisant une approximation de l'inverse du Hessien. Leurs performances relatives sont discutées.

{M16} ZELEZNIC, F.J. - Quasi-Newton methods for nonlinear equations.

J.A.C.M., vol.15, 1968, p.265

*Cet article est une revue des méthodes utilisant un
Jacobien inverse approché. Les performances de celles-ci
sont comparées.*

Dernière page d'une thèse

VU

Grenoble, le

Le Président de la thèse

VU, et permis d'imprimer,

Grenoble, le

Le Président de l'Université Scientifique et
Médicale de Grenoble