

Sur la dynamique et la commande des colonnes multicomposées

Yann Creff

► To cite this version:

Yann Creff. Sur la dynamique et la commande des colonnes multicomposées. Automatique / Robotique. École Nationale Supérieure des Mines de Paris, 1992. Français. NNT: 1992ENMP0376 . pastel-00838254

HAL Id: pastel-00838254 https://pastel.hal.science/pastel-00838254

Submitted on 25 Jun2013

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 à

L'ÉCOLE NATIONALE SUPÉRIEURE DES MINES DE PARIS

par

Yann CREFF

pour obtenir le titre de

DOCTEUR DE L'ÉCOLE DES MINES DE PARIS

Spécialité :

MATHÉMATIQUES ET AUTOMATIQUE

Sujet de la thèse :

SUR LA DYNAMIQUE ET LA COMMANDE DES COLONNES MULTICOMPOSÉES

soutenue le 8 décembre 1992 devant le jury composé de :

MM. Georges BASTIN John Mac GREGOR

> Dominique BONVIN Jean-Pierre CORRIOU Jean LAFORET Jean LÉVINE Pierre ROUCHON

Président et Rapporteur Rapporteur

Examinateur Examinateur Examinateur Examinateur Examinateur

Remerciements

Je tiens à remercier M. Bastin pour avoir accepté de présider ce jury de thèse, ainsi que tous les membres du jury pour l'intérêt qu'ils ont bien voulu accorder à ce travail.

Il s'est effectué au Centre Automatique et Systèmes de l'École Nationale Supérieure des Mines de Paris. Que Jean Lévine, qui m'y a accueilli, trouve ici l'expression de ma reconnaissance. Ses conseils m'ont permis de mener à bien ce travail.

La bonne ambiance régnant au centre m'incite à en remercier indistinctement tous les membres. Je crois légitime pourtant de distinguer parmi ces personnes les membres travaillant à Paris, que j'ai cotoyés quotidiennement et avec qui j'ai le plus travaillé : Pierre Rouchon, toujours disponible et d'excellent conseil, Christian Albaret et Pascal Duchène.

Je remercie toutes les personnes de la société ELF-ANTAR France étant ou ayant été concernées, de près ou de loin, par le projet COLBIN.

Table des matières

Intro	oduction	i i i i i i i i i i i i i i i i i i i	7
1.1	Fonctionnement et conduite des colonnes à distiller		8
	1.1.1	Principe de fonctionnement d'une colonne	8
	1.1.2	Conduite d'une colonne	9
	Ré	égulations de base	12
	Co	ontrôle en qualité	12
1.2	Modéli	sation du comportement dynamique pour la commande robuste	13
	1.2.1	Cas linéaire	14
	1.2.2	Cas non-linéaire	14
Mo	dèles d	le colonnes à distiller	17
Modéliser la dynamique des colonnes			19
2.1	Un mo	dèle complet	19
	2.1.1	Modèle de plateau	20
 Hypothèses 		Hypothèses	20
	• 1	Description	20
	2.1.2	Modèle de ballon de tête	22
	• 1	Hypothèses	22
	• 1	Description	22
	2.1.3	Modèle de ballon de fond	24
	• 1	Hypothèses	24
	• 1	Description	24
	2.1.4	Modèle thermodynamique	26
	Intro 1.1 1.2 Mod 2.1	Introduction 1.1 Fonction 1.1.1 Fonction 1.1.1 Fonction 1.1.1 Fonction Reference	Introduction Introduction Introduction Intervention Inter

		2.1.5	Modèle hydrodynamique	27	
		2.1.6	Modèle complet et commentaires	29	
		•	Index et résolution numérique	29	
		•	La description est-elle suffisante ?	30	
		2.1.7	Notations	30	
	2.2	Le mod	lèle (L,V)	36	
		2.2.1	Etablissement du modèle (L,V)	36	
		2.2.2	Ecriture du modèle (L,V)	38	
		• 1	Rappel des hypothèses et des notations	38	
		• 1	Description	39	
3	Prop	riétés d	u flot et points stationnaires	41	
	3.1	Existen	ce de trajectoires pour des temps non bornés. Dépendance paramétrique		41
	3.2	Existen	ce d'au moins un point stationnaire	42	
	3.3 Unicité du point stationnaire			42	
		3.3.1	Des points stationnaires multiples observés en simulation	43	
		3.3.2	Colonne binaire	43	
		3.3.3	Colonne multicomposée	44	
		• 1	Rappel de résultats partiels	45	
		• 2	Technique de type point fixe	46	
		•	Généralisation directe de la démonstration dans le cas binaire	47	
4	Stabi	ilité		49	
	4.1	Colonn	es binaires	49	
		4.1.1	Stabilité de la dynamique	49	
		4.1.2	Etude du linéarisé tangent	50	
	4.2	Colonn	es multicomposées	52	
5	Rédu	Réduction			
	5.1	La tech	nique d'agrégation des plateaux	56	
		5.1.1	Propriétés en boucle ouverte du modèle agrégé	61	
	5.2	Réduct	ion des modèles (L,V) de colonnes pseudo-binaires	61	
		5.2.1	Introduction par un exemple	61	

7

		5.2.2	Colonnes pseudo-binaires	66
		•	Définition	60
		•	Propriétés limites des fonctions d'équilibre	6
		5.2.3	Etablissement du modèle dans un cas simple	69
		69		
		69		
		70		
		75		
		74		
	Description du modèle			73
		76		
		5.2.5	Agrégation par plateaux du modèle simplifié	78
		E	tablissement du modèle en cinq compartiments	78
		P	ropriétés du modèle agrégé	80
в	Cor	nmand	le de colonnes	81
6	Commande de modèles réduits			83
	6.1 Commande d'un modèle réduit binaire			83
	6.2	6.2 Commande du modèle réduit pseudo-binaire		84
		6.2.1	Preuve	85
		E	puisement	86
		R	ectification	87
		6.2.2	Synthèse en température	90
7	Autres approches			91
	7.1 Utiliser des régulateurs proportionnels-intégraux		93	
		7.1.1	La méthode	93
		7.1.2	La matrice des gains relatifs	94
	Principe			94
	Limites de la RGA et dérivées			95
	7.2 Commande sur le modèle (L,V) complet			97
		7.2.1	Commande de l'approximation tangente	97

3

4	_		Table des mat	ières
	_	7.9.9	Commando non linésire du modèle	98
		7.0.2	Commentaines	90
	7.0	1.2.3 C	Commentaires	100
	1.3	Comma	inde predictive	100
	1.4	Comma	indes stationnaires de modeles reduits	101
	1.5	Synthe	Europeia de commende d'un medèle réduit	101
		1.5.1	Exemple de commande d'un modele reduit	104
8	Simulations			
	8.1 Comparaisons de diverses méthodes		raisons de diverses méthodes	107
		8.1.1	Description de la colonne	107
		8.1.2	Description des lois de commande testées	108
		Co	ommande linéaire du modèle (L,V) complet	108
		Co	ommande non-linéaire du modèle (L,V) complet	109
		Co	mmande linéaire d'un modèle réduit par la technique des réalisation équilibrées	109
		Commande non-linéaire d'un modèle réduit par agrégation des plate		109
		8.1.3	Résultats	110
		Pr	emière figure	110
		Se	conde figure	111
		Co	onclusions	ш
	8.2	Comma	ande d'un modèle réduit de colonne pseudo-binaire	112
9	Résultats sur site 1			
	9.1 Le programme temps-réel COLBIN		gramme temps-réel COLBIN	121
		9.1.1	Modes de fonctionnement	121
		9.1.2	Mise en place	122
	9.2	Résultats sur site		122
		9.2.1	La stabilisation des essences	123
		9.2.2	Le dépropaniseur	123
10	Commande d'un réseau de colonnes 1			
	10.1	1 Description du procédé sur site		131
		10.1.1	Mélange à séparer et schéma de séparation	131
		10.1.2	Variables de commande et variables à commander	132

		10.1.3	Régulations de base et commande en qualité	133
		• 1	Régulations de base	133
		• (Commande en qualité	133
	10.2	Descrip	tion minimale du procédé	134
		10.2.1	Agrégation des composés	134
		10.2.2	Objectif de la commande en qualité	135
	10.3	Ecritur	e d'un modèle de commande	135
		10.3.1	Description des flux totaux internes	135
		10.3.2	Agrégation	135
		10.3.3	Equations de la commande	136
		10.3.4	Synthèse par les températures	137
	10.4	Perform	nances de la commande	138
11	Cone	lusion		143
с	Anr	iexes		145
A	Géométrie de la dynamique du flash			147
	A.1	Prélimi	naires thermodynamiques	147
	A.2 Modèle algébro-différentiel			149
	A.3	Passage	150	
	A.4	Interpre	étation comme système gradient	152
		A.4.1	Structure riemannienne	152
		A.4.2	La dynamique dérive d'un potentiel	153
	 Production d'entropie 			153
		• 1	Le système gradient	155
	A.5	Conclus	sion	157
в	Forme du jacobien des fonctions d'équilibre 1			159
с	Remarque sur l'observateur de Deza-Gauthier 16			163
D	Résultats de la littérature			165
	D.1	Approx	imation des systèmes	165

5

	D.1.1	Théorème de Tikhonov	165
	D.1.2	Théorème de la variété centre	166
D.2	Le théorème de Rosenbrock		167

Chapitre 1

Introduction

La régulation des colonnes à distiller est un des problèmes les plus étudiés à l'intersection de l'automatique et du génie chimique. Durant les trente dernières années, de très nombreux chercheurs ont proposé diverses méthodes pour l'appréhender. Nos travaux s'inscrivent dans le cadre de la commande non-linéaire des colonnes, initiée par Gauthier et Bornard au milieu de la décennie précédente [44]. Ils sont directement inspirés des résultats de Lévine et Rouchon [98, 72], dont ils constituent une extension. Ces auteurs ont considéré plus particulièrement le cas des mélanges binaires; notre principal résultat concerne le calcul de lois permettant le rejet de perturbations pour une classe de colonnes multicomposées, les colonnes pecudo-binaires.

Ce mémoire comprend deux parties :

- la première est consarrée à l'établissement de modèles de la dynamique des colonnes. Nous y proposons dans un premier chapitre une méthode pour la construction de modèles de simulation. Dans le second chapitre, nous détaillons l'établissement d'un modèle simplifié, appelé modèle (L,V). Les trois chapitres suivants concernent l'étude des propriétés de ce modèles. Aus savons souhaité insister sur les difficultés particulières des mélanges non-binaires. Le lecteur retrouvera donc la dichotomic colonne binaire-colonne multicomposée dans l'étude des points stationnaires du modèle, dans l'étude des a téduction. C'est dans ce chapitre que nous décrivons une nouvelle méthode pour réduire les modèles (L,V) de colonnes pseudo-binaires. Nous démontrons alors plusieurs propriétés intéresantes vérifiées par de tels modèles modèles.
- la seconde partie traite de la commande des colonnes à distiller. Nous abordons dans un premier chapitre la commande non-linéaire de modèles réduits. Le second chapitre est un panorama des méthodes existantes. Par des simulations, nous comparons, au troisième chapitre, les diverses approches. Un quatrième chapitre présente le logiciel temps réélécrit pendant cette thise et des relevés sur site. Dans le dernier chapitre, nous présentons l'étude de deux colonnes couplées. Ce travail constitue à notre connaissance la première tentative pour la commande non-linéaire de tels procédés.

On trouvera en annexe deux résultats nouveaux, sur la dynamique du flash et sur le jacobien des fonctions d'équilibre liquide-vapeur. Nous discutons ensuite brièvement de l'applicabilité d'un observateur récemment proposé. Cette partie annexe est complétée par le rappel de quelques résultats de la littérature.

1.1 Fonctionnement et conduite des colonnes à distiller

La contribution de ce travail réside dans l'extension de l'analyse du comportement qualitatit et de la commande des colonnes à distiller au cas pseudo-binaire. Le but de cette section est d'expliquer qualitativement le fonctionnement d'une colonne à distiller et de poser le problème de commande. Nous y introduisons le vocabulaire qui sera constamment utilisé dans la suite de ce mémoire.

1.1.1 Principe de fonctionnement d'une colonne

La distillation [128] est l'une des opérations unitaires utilisées pour le raffinage. Elle permet d'isoler les divers constituants d'un mélange de composés chimiques. Elle a pour origine le résultat d'expérience suivant. Quand un mélange d'hydrocarbures est placé dans une enceinte sons certaines conditions de température et de pression, deux phases différentes apparaissent, l'une liquide el l'autre vapeur, et un équilibre thermodynamique s'etablic turte elles. Une analyse de la composition des deux phases révèle que la vapeur contient préférentiellement les composés dont la masse molaire est petite. Cette opération de séparation, appelée flash, peut s'électure de façon continue. L'enceinte est alimentée par le mélange et deux flux en sortent, un flux de liquide, plus riche en composés lourds que le mélange de départ, et un flux de vapeur, plus riche en composés logres.

En pratique, la séparation aimi obtenue n'est pas assez sélective et l'on procède par séparations successives. Les opérations de fash ont physiquement lieu sur des plateaux, empliés à l'intérieur d'une colonne. Chaque plateau est alimenté à la fois par la phase vapeur sortant du plateau inférieur et par la phase liquide sortant du plateau supérieur. On parle d'opération à contrecourant. Un plateau spécial, le plateau d'alimentation, reçoit en plus le mélange à séparer. Un équilibre thermodynamique tend à s'établir sur chaque plateau, entre les quantités de liquide et de vapeur qui y sont retemes.

On distingue traditionnellement deux zones dans une colonne :

la zone de rectification est l'ensemble des plateaux situés au-dessus du plateau d'alimentation;

 la zone d'épuisement est l'ensemble des plateaux situés au-dessous du plateau d'alimentation.

Dans le cas le plus simple, illustré sur la figure (1.1), le flux de vapeur qui sort en haut (ou en tête) de la colonne est totalement condensé. Le liquide ainsi obtenu est divisé en deux parties : le distillat, qui est un des produits de la séparation, et le reflux, qui constitue l'alimentation liquide du plateau de tête. Le produit liquide soutiré en bas (ou en fond) de la colonne est un autre produit de la séparation, le résidu. Il est en partie vaporisé dans un rebouilleur pour générer le flux de vapeur au fond de la colonne.

La pression est pratiquement identique sur tous les plateaux (elle croît en fait très faiblement d'un plateau au plateau inférieur), mais est plus faible dans le ballon de tête qu'en fond de colonne, ce qui permet aux flux de vapeur de monter par différence de pression. Les flux de liquide quant à eux descendent par gravité.

Moyennant un nombre suffisant de ces flashes successifs, on réussit à obtenir un distillat con tenant essentiellement les composés légers et un résidu contenant essentiellement les composés lourds.

Comme une séparation totale n'est ni possible ni d'ailleurs systématiquement souhaitée, on caractérise les produits de la distillation par leurs taux d'impureté :

- pour le distillat, le taux d'impureté est la proportion de composés lourds qu'il contient;
- pour le résidu, le taux d'impureté est la proportion de composés légers qu'il contient.

Définisons plus précisément ce qu'on entend par composés légers et composés lourds. Lorsqu'on veut diviser en deux produits le flux d'alimentation, deux composés jouent un rôle particulier. On les appelle les composés clés. On commence ainsi par choisir une clé légère et une clé lourde, le but de la séparation par la colonne étant de minimiser à la fois la quantité de clé lourde dans le distillat et la quantité de clé légère dans le résidu. Puis on cherche a établir sur les plateaux (exception faite éventuellement des plateaux proches des extrémités) les conditions d'un équilibre liquide-vapeur tel que la clé légère tende à se concentrer dans la vapeur et la clé lourde dans le liquide. Les autres composés majoritairement entrainés dans la vapeur forment alors avec la clé légère l'ensemble des composés légers. Inversement, les composés majoritairement entrainés dans le liquide formet avec la clé lourde l'ensemble des composés lourds.

Une valeur adéquate de la pression dans la colonne permet de garantir l'existence d'un équilibre fiquide-vapeur pour toute la plage des compositions rencontrées sur les plateaux. Pour une colonne standard, à pression fixée, la température d'équilibre est d'autant plus faible que le mélange est riche en composés légers : la température doit décroitre d'un plateau plateau supérieur. Cette différence de température entre lette et le fond de la colonne, qui fait la qualité de la séparation, est obtenue par un apport de calorise en fond (via la puissance de rebouillage) et par un apport de frigorise en téte (via le débit de reflux).

1.1.2 Conduite d'une colonne

Pour la raison mentionnée plus haut, la pression de fonctionnement est un des paramètres fondamentaux lors de la conception d'une colonne. En pratique, on régule précisément la pression sur le plateau de tête autour de cette valeur. Ce faisant, on régule en fait la pression sur chaque plateau, à de faibles variations près dues à des phénomènes hydrodynamiques.

Pour pouvoir modifier les débits internes dans la colonne et adoucir les variations de composition des produits, on dispose en haut et en bas de ballons contenant des quantités de liquide nettement plus importantes que sur les plateaux (voir figure 1.1):



- grâce au ballon de tête, on peut augmenter le débit de reflux, donc les débits internes de liquide;
- par vaporisation du contenu du ballon de fond, on peut augmenter les d

 ébits internes de vapeur.

Pour disposer à tout instant de ces retenues, on régule les niveaux de liquide dans les deux ballons.

D'un point de vue automatique, la pression sur le plateau de tête et les deux niveaux sont des sorties du système. En comptant les entrées sur lesquelles on peut agir, les commandes du système, on s'aperçoit qu'il est possible de réguler deux autres sorties : on cherche généralement à réguler les taux d'impureté dans le distillat et dans le résidu.

A l'exclusion du débit et de la composition de l'alimentation, qu'il faut considérer comme des perturbations, les entrées du système sont :

la puissance fournie pour condenser le flux des vapeurs de tête, Q_c ;

la puissance fournie au rebouilleur pour vaporiser une partie du résidu, Q;

le débit de résidu, R;

le débit de distillat, D;

le débit de reflux, L;

On dispose donc de cinq commandes pour commander cinq sorties :

- la pression de tête;
- le niveau de tête;
- le niveau de fond;
- le taux d'impureté dans le distillat;

le taux d'impureté dans le résidu.

Pour assurer le bon fonctionnement de la colonne, il est nécessire de réguler efficacement la pression de tête et les niveaux. Ces variables ont des dynamiques plus rapides que celles des taux d'impuréé. Aborder globalement le problème de la régulation des cinq sorties implique donc un mélange de dynamiques aux constantes de temps sensiblement différentes, qui conduit à des problèmes de robustesse. On préfère à cette approche une commande hierarchisée :

 les régulations de base, pression de tête et niveaux, sont d'abord définies. Leurs dynamiques ont des constantes de temps de l'ordre de cinq minutes; les régulations des taux d'impureté sont conçues ensuite sous l'hypothèse de bon fonctionnement des régulations de base. Leurs dynamiques ont des constantes de temps de l'ordre de la demi-heure.

Seule la seconde partie nous intéresse dans ce mémoire. C'est la commande en qualité -"dual composition control"-.

Régulations de base

Elles sont assurées par des boucles proportionnelles-intégrales. A priori, n'importe quelle commande peut être choisie pour réguler chacune de ces sorties et on peut effectivement rencontrer sur site la plupart des combinaisons possibles [67]. Il existe cependant une combinaison majoritairement adoptée par les concepteurs de colonnes. Elle consiste à :

- réguler la pression de tête par la puissance de condensation;
- réguler le niveau de tête par le débit de distillat;
- réguler le niveau de fond par le débit de résidu.

Ce choix permet d'éviter l'introduction dans la colonne, via le débit de reflux et la puissance de rebouillage, des fluctuations rapides inhérentes à ce type de régulations : ce sont les produits de la séparation qui fluctuent. C'est généralement lorsque ce phénomène est génant qu'une autre combinaison est choisie. Nous reviendrons sur ces aspects lors du chapitre consacré à la commande linéaire. Pour l'essentiel de ce ménoire, cette combinaison est adoptée. Les commandes disponibles pour le contrôle en qualité de la séparation sont donc le débit de reflux et la puissance de rebouillage.

Contrôle en qualité

Dans une raffinerie, chaque colonne s'intègre dans une unité qui regroupe diverses opérations élémentaires. Son alimentation est un flux résultant d'une ou de plusieurs opérations situées en amont. Elle est donc sujette à des variations de débit et de composition.

Il est possible, moyennant une cuve intermédiaire, de réguler ce débit d'alimentation et d'amortir les variations de sa composition. Cette solution est coûteuse. On la rencontre surtout en pétrochimie, lorsque la séparation est très difficile et que le prix des produits fabriqués incite à la conception de colonnes simples à piloter.

Dans les autres cas, les variations de l'alimentation peuvent perturber sensiblement le fonctionnement de la colonne. Il est nécessaire d'agir plus rapidement sur les deux commandes disponibles afin d'éviter que les sorties ne s'éloignent trop des spécifications fixées. En pratique, le débit de l'alimentation est mesuré mais sa composition ne l'est pas. Nous abordons donc le problème suivant. Le contrôle en qualité d'une colonne à distiller a pour but de maintenir à des spécifications fixées les taux d'impureté dans le distillat et dans le résidu, en présence de variations de l'alimentation, mesurées pour le débit mais non mesurées pour la composition.

Mentionnons ici deux caractéristiques des colonnes, qui précisent le type du problème à traiter. Supposons l'alimentation constante.

 Le changement d'une des deux commandes (débit de reflux ou puissance de rebouillage) se traduit par un changement des deux sorties : le problème est donc vraiment multivariable.

La sensibilité des sorties aux variations des commandes (les gains statiques) dépend du point de fonctionnement choisi : le problème est donc non-linéaire.

1.2 Modélisation du comportement dynamique pour la commande robuste

Depuis ses débuts, l'automatique présuppose une connaissance adéquate des systèmes pour en synthétiser la commande. Cette connaissance est consignée dans ce qu'on appelle communément un modèle, qui doit permettre de reproduire et prédire les phénomènes dynamiques que l'on désire compenser. Aussi, il ne s'agit pas d'expliquer mais d'utiliser une connaissance approchée pour agir. Cette approche reste empirique : aucune méthode n'existe pour déterminer dans le modèle l'information indispensable à la commande. Nous allons brièvement introduire la démarche suivie dans ce travail, sans nous référer à son application à la commande des colonnes à distiller.

Très souvent, les modèles issus de la physique des procédés mèlent des phénomènes rapides et stables à des phénomènes lents. De plus, les phénomènes rapides sont souvent satisfaisants, de telle sorte que l'on désire uniquement modifier les comportements lents. La question importante qui se pose dans ce contexte concerne la possibilité de synthéliser, uniquement à partir des variables lentes du système, des lois de commande permettant ces modifications. Si une telle synthèse est possible, alors la commande, indépendante des comportements rapides, est plus robuste vis à vis de leurs perturbations. Le problème est simple dans le cas linéaire, que nous exposons dans une première section. A l'inverse, dans le cas non-linéaire, la question reste en grande partie ouverte, sauf pour les systèmes singulièrement perturbés que nous analysons dans une seconde section. Les colonnes à distiller entrent dans cette catégorie : les lois de commande non-linéaires de modèles réduits que nous présentons dans ce mémoire peuvent être comprises dans ce sens.

1.2.1 Cas linéaire

Soit le système linéaire

$$\begin{cases} \dot{x}_1 = A_1x_1 + B_1u \\ \dot{x}_2 = A_2x_2 + B_2u \end{cases}$$

pour lequel

- les valeurs propres de A₂ sont toutes à partie réelle strictement négative;
- dans le plan complexe, il existe une droite, parallèle à l'axe imaginaire, qui sépare les valeurs propres de A₁ de celles de A₂. Les parties réelles des valeurs propres de A₁ peuvent donc être soit positives, soit nulles, soit négatives tout en restant, dans ce dernier cas, strictement supérieures à celles de A₂.

Dans ces conditions, il existe pour u fixé deux variétés invariantes transverses [109], qui sont simplement $x_1 = 0$ et $x_2 = 0$.

Si la paire (A_1, B_1) est commandable, il est possible de stabiliser globalement ce système par un bouclage $u = Kx_1$. En effet, dans ce cas le système bouclé est triangulaire et visiblement stable puisque $A_1 + B_1K$ et A_2 sont des matrices dont les valeurs propres sont à parties réelles négatives.

L'intérêt de cette démarche est que la loi de commande n'utilise qu'une partie de l'état. De plus, la variété $x_1 = 0$ est invariante par le bouclage. Les erreurs de modélisation de A_2 n'ont aucune influence sur les performances du système bouclé.

1.2.2 Cas non-linéaire

Le cas non-linéaire est plus complexe. Décrivons le cas des systèmes singulièrement perturbés. Soit donc

$$\begin{cases}
\dot{x}_1 = f_1(x_1, x_2, \varepsilon, u) \\
\varepsilon \dot{x}_2 = f_2(x_1, x_2, \varepsilon, u)
\end{cases}$$
(1.1)

où ε est un petit réel positif, x_1 l'état lent et x_2 l'état rapide. Supposons que

 $(x_1, x_2, u) = (0, 0, 0)$ soit un point stationnaire de (1.1), indépendamment de ε . Il est toujours possible de se ramener à ce cas;

 la partie rapide est localement stable : les valeurs propres de (∂f₂/∂x₂), exprimée au point stationnaire, sont à parties réelles strictement négatives.

le spectre de l'approximation tangente au point stationnaire se compose de deux parties distinctes. Considérons les parties réelles de ce spectre : il existe une distance de l'ordre de 1/c entre la plus grande partie réelle associée à la partie rapide et la plus petite partie réelle associée à la partie lente. En boucle ouverte (u = 0) D'après nos hypothèses, il existe localement autour du point stationnaire deux variétés invariantes transverses [109] :

- Σ_1 , d'équation $x_2 = h_2(x_1, \varepsilon)$, est la variété lente du système. Elle est attractrice et définie à $O(\varepsilon)$ près par $f_2(x_1, h_2(x_1, 0), 0, 0) = 0$;
- Σ₂, d'équation x₁ = h₁(x₂, ε), est la variété rapide du système. Elle est définie à O(ε) près par x₁ = 0.

En boucle fermée Considérons le bouclage $u = k(x_1)$, avec k(0) = 0. Le bouclage préserve la structure singulièrement perturbée (les parties réelles des valeurs propres de $(\partial f_2/\partial x_2)$ sont en $1/\varepsilon$). Il existe toujours, localement autour du point stationnaire, deux variétés invariantes transverses

- Σ₁^k, d'équation x₂ = h₂^k(x₁, ε), est la variété lente. Elle est attractrice et définie à O(ε) près par f₂(x₁, h₂^k(x₁, 0), 0, k(x₁)) = 0;
- Σ_2^k , d'équation $x_1 = h_1^k(x_2, \varepsilon)$, est la variété rapide. Elle est définie à $O(\varepsilon)$ près par $x_1 = 0$.

Ainsi, modulo des termes en $O(\varepsilon)$, la variété rapide est préservée par le bouclage, $\Sigma_2^k \simeq \Sigma_2$. Par contre, la variété lente est modifée, $\Sigma_1^k \neq \Sigma_1$. Localement, l'espace E_2 correspondant à Σ_2 reste inchangé alors que l'espace E_1 correspondant à Σ_1 est transformé en l'espace E_1^k , correspondant à Σ_1^k . Ces phénomènes sont illustrés sur la figure (1.2).

On voit qu'il est possible dans le cas singulièrement perturbé de construire par un retour statique et partiel de l'état des lois de commande qui préservent la structure du système · la partie rapide que l'on souhaite conserver n'est pas modifiée.

Dans l'étude qui nous intéresse, la commande en qualité des colonnes à distiller, le système est sous forme singulièrement perturbée : l'approche suivie est conforme à ce qui vient d'être décrit.

Le cas des systèmes non singuilièrement perturbés est plus difficile à traiter. Lorsqu'il existe une séparation entre les valeurs propres de l'approximation tangente, impliquant l'existence de deux variétés invariantes transverses, cette approche est-elle généralisable? Une généralisation est possible à partir de bouclages dynamiques [15], mais la question reste en grande partie ouverte et dépase le carde de ce mémoire.



Figure 1.2: Le cas singulièrement perturbé

\mathbf{A}

Modèles de colonnes à distiller

Chapitre 2

Modéliser la dynamique des colonnes

Nous exposons dans ce chapitre les hypothèses et les équations utilisées pour modéliser la dynamique des colonnes à distiller. Nous insistons particulièrement sur deux modèles .

un modèle "complet", dont le but est de représenter finement les phénomènes réels. Utilisé dans un simulateur, il nous permet principalement de tester diverses approches pour la régulation en qualité.

 - un modèle simplifié, dit modèle (L,V) -"constant molal overflow model"-. De nombreuses lois de commande, dont celles que nous préconisons, sont synthétisées à partir de ce modèle : nous détaillons ici sa construction. L'étude de ses propriétés fait l'objet des trois chapitres suivants.

2.1 Un modèle complet

Les progrès de l'informatique ont permis l'émergence d'un nouvel outil qui trouve sa place entre la conception des lois de commande et leurs essais sur usite. Cet outil est la simulation, qui tend à remplacer avantageusement les essais sur les pilotes ou les maquettes. Il nécessite néanmoins des modèles algèbro-différentiels représentant la dynamique des procédée étudiés, la règle beuristique suivante est très souvent utilisée ; plus les modèle incopre de phénomènes physiques, plus proches de la réalité sont les résultats obtenus par l'intégration de ses équations. Il convient cependant d'être prudent :

- la manière d'écrire les équations d'un système algébro-différentiel peut avoir une influence sur la validité des résultats de simulation. C'est le problème de l'index [98];
- l'augmentation du nombre des phénomènes pris en compte va de pair avec l'augmentation des paramètres du modèle. Ces derniers sont souvent mal connus ou difficilement estimables. Il peut être préférable de négliger un phénomène que de mal le modéliser. Le but du modèle doit de toutes façons renseigner son concepteur sur la richesse des phénomènes à représenter.

En tenant compte de ces remarques, nous détaillons dans cette section un modèle de colonne à distiller. C'est ce type de modèle que nous utilisons pour tester en simulation les lois de commande présentées dans la suite de ce mémoire.

2.1.1 Modèle de plateau

Hypothèses

Nous adoptons les hypothèses classiques suivantes :

le liquide et la vapeur sont à l'équilibre thermodynamique;

le liquide, comme la vapeur, est homogène;

les parois du plateau sont adiabatiques;

Les modèles utilisés pour les équilibres thermodynamiques et l'hydrodynamique sont décrits respectivement dans les sections 2.1.4, page 26 et 2.1.5, page 27

Description

Le modèle est algébro-différentiel :

- la partie différentielle consiste en les bilans de matière et d'énergie, pour lesquels la variation des quantités accumulées égale la différence entre les flux entrant et sortant du plateau [59];
- la partie algébrique comprend trois types d'équations :

le calcul des quantités accumulées;

les équations d'équilibre thermodynamique;

les équations du modèle hydrodynamique.

En utilisant les notations regroupées à la section 2.1.7, page 30, le modèle s'écrit :

$$\begin{split} & \text{ bilan de matière } \\ & \frac{dN_i^s}{dt} = L_{j-1}^i + V_{j+1}^i - L_j^i - V_j^i \qquad (i=1,\dots,c) \\ & \text{ bilan d'énergie } \\ & \frac{dU_j}{dt} = h^i(\tilde{L}_{j-1}, P_{j-1}, T_{j-1})L_{j-1} + h^s(\tilde{V}_{j+1}, P_{j+1}, T_{j+1})V_{j+1} \\ & -h^i(\tilde{L}_j, P_j, T_j)L_j - h^s(\tilde{V}_j, P_j, T_j)V_j \\ & \text{ calcul des quantités accumulées } \\ & N_j^s = \frac{V_j^{isq}}{v^i(\tilde{L}_j, P_j, T_j)L_j} + \frac{V_j^{isq} - V_j^{isq}}{v^s(\tilde{V}_j, P_j, T_j)}V_j^i \qquad (i=1,\dots,c) \\ & U_j = \frac{V_j^{isq}}{v^i(\tilde{L}_j, P_j, T_j)}L_j^i + \frac{V_j^{isq} - V_j^{isq}}{v^s(\tilde{V}_j, P_j, T_j)}w^s(\tilde{V}_j, P_j, T_j) \\ & \text{ equilibre thermodynamique } \\ 0 = \mu^{is}(\tilde{L}_j, P_j, T_j) - \mu^{ss}(\tilde{V}_j, P_j, T_j) \qquad (i=1,\dots,c) \\ & \text{ embedde hydrodynamique } \\ P_{j+1} - P_j = \Delta_j^{ist}(z_j, \tilde{P}_j, T_j, \tilde{V}_{j+1}, \tilde{V}_{j+1}, T_{j+1}, T_{j+1}) \\ P_{j+1} - P_j = T_j^{iss}(z_j, \tilde{V}_j, P_j, T_j, \tilde{V}_{j+1}, P_{j+1}, T_{j+1}) \\ & V_j^{iss} = T_j^{iss}(z_j, \tilde{V}_j, V_j, P_j, T_j), \end{split}$$

où nous notons $L_j = \sum_{i=1}^{c} L_j^i$ et $\tilde{L}_j = (L_j^i)^{i=1,\dots,c}$ Les mêmes notations valent pour les débits de vapeur et, dans la suite, pour les moles retenues et les potentiels chimiques.

Le modèle hydrodynamique, décrit à la section 2.1.5, page 27, fournit Δ_j^{het} , Δ_j^{rep} et Υ_j^{het} . Le modèle thermodynamique, décrit à la section 2.1.4, page 26, fournit les volumes molaires $w^i(\vec{L}_j, P_j, T_j)$ et $w^u(\vec{V}_j, P_j, T_j)$, les enthalpies molaires $h^i(\vec{L}_j, P_j, T_j)$ et $h^u(\vec{V}_j, P_j, T_j)$, les énergies molaires $u^i(\vec{L}_j, P_j, T_j)$, et $u^u(\vec{V}_j, P_j, T_j)$, les énergies molaires de la potentiels chimiques $\vec{\mu}^i(\vec{L}_j, P_j, T_j)$ et $\vec{\mu}^v(\vec{V}_j, P_j, T_j)$. Les inconnues du plateau i sont

 \vec{N}_1 , le vecteur des nombres de moles accumulées;

 \vec{V}_i , le vecteur des débits molaires partiels de vapeur;

- U₁, l'énergie interne associée à l'étage;
- P1, la pression de l'équilibre thermodynamique;
- T₁, la température de l'équilibre thermodynamique;

z₁, la hauteur de liquide dans le déversoir;

ν^{hq}, le volume de liquide sur le plateau.

Pour le plateau d'alimentation, les bilans de matière et d'énergie prennent en compte les débits partiels de la charge et son enthalpie.

2.1.2 Modèle de ballon de tête

Hypothèses

Nous supposons que

 - la condensation est totale, ce qui signifie qu'il n'y a pas de distillat vapeur. Il existe néannoins un équilibre liquide-vapeur dans le ballon : la vapeur occupe l'espace laissé libre par le liquide.

le passage dans le condenseur introduit une perte de charge constante;

la pression au plateau 2 est régulée par une action proportionnelle-intégrale sur la puissance de condensation;

le volume de liquide (niveau de tête) est régulé par une action proportionnelle-intégrale sur le débit de distillat;

- le débit de reflux, disponible pour la commande en qualité, est fixé par l'utilisateur;

Description

Remarque 1 Pour le conditionnement numérique du système, nous introduisons un distillat vapeur (dégazage) dont le débit total est fizé à une valeur arbitrairement petite, inférieure au millème du débit vapeur entrant.

Le modèle est algébro-différentiel. Sa structure est semblable à celle d'un modèle de plateau. Les bilans sont modifiés pour distinguer le débit de reflux et le débit de distillat. Le modèle hydrodynamique se réduit à une perte de charge constante dans le condenseur. Des équations pour la restriction du distillat vapeur et les régulations complétent la description.

Remarque 2 \vec{L}_1 représente le reflux, soit l'alimentation liquide du plateau 2. Contrairement au modèle de plateau décrit à la section précédente, il ne rend pas compte de la totalité du liquide sortant du ballon de tête.

Remarque 3 L'homogénéité de degré zéro des fonctions du modèle thermodynamique permet d'effectuer les calculs avec les débits partiels \vec{L}_1 Les inconnues sont

- N₁, le vecteur des nombres de moles accumulées;
- L
 ₁, le vecteur des d

 ébits molaires partiels de reflux ;
- V
 ₁, le vecteur des d
 ébits molaires partiels de vapeur;
- U₁, l'énergie interne associée à l'étage,
 - P1, la pression de l'équilibre thermodynamique;
- T₁, la température de l'équilibre thermodynamique;

 \mathcal{V}_{1}^{liq} , le volume de liquide dans le ballon;

- Q^{cond}, la puissance de condensation;

D, le débit de distillat;

I^{cond}, le terme intégral du régulateur de pression;

ID, le terme intégral du régulateur de niveau.

2.1.3 Modèle de ballon de fond

Hypothèses

Nous supposons que

le rebouillage est une source d'énergie qui permet de vaporiser une partie du liquide présent dans le ballon;

le liquide et la vapeur sont à l'équilibre thermodynamique;

le volume de líquide (niveau de fond) est régulé par une action proportionnelle-intégrale sur le débit de résidu;

la puissance de rebouillage, disponible pour la commande en qualité, est fixée par l'utili sateur.

Description

Par rapport à un modèle de plateau, les bilans sont modifiés car le ballon, s'il n'est pas alimenté en vapeur, bénéficie d'une source d'énergie extérieure. Il n'existe pas de modèle hydrodynamique, mais la régulation du niveau doit être décrite.

$$\begin{array}{l} \begin{array}{l} \textbf{ bilan de matière} \\ \frac{dN_n^i}{dt} &= L_{n-1}^i - L_n^i - V_n^k \qquad (i=1,\ldots,c) \\ \textbf{ bilan d'énergie} \\ \frac{dU_n}{dt} &= h^i (\tilde{L}_{n-1}, P_{n-1}, T_{n-1}) L_{n-1} \\ &- h^i (\tilde{L}_n, P_n, T_n) L_n - h^n (\tilde{V}_n, P_n, T_n) V_n + Q^{rdo} \\ \textbf{ calcul des quantités accumulées} \\ N_n^i &= \frac{V_n^{log}}{v^i (\tilde{L}_n, P_n, T_n) \tilde{L}_n} - \frac{h^{u_i} (\tilde{V}_n, P_n, T_n) V_n}{v^i (\tilde{V}_n, P_n, T_n) \tilde{V}_n} \quad (i=1,\ldots,c) \\ U_j &= \frac{V_n^{log}}{v^i (\tilde{L}_n, P_n, T_n)} L_n^i + \frac{V_n^{log} - V_n^{log} V_n^i}{v^i (\tilde{V}_n, P_n, T_n) + \frac{V_n^{log} - V_n^{log}}{v^i (\tilde{V}_n, P_n, T_n)} u^v (\tilde{V}_n, P_n, T_n) \\ &\quad \textbf{ cquilibre thermodynamique} \\ 0 &= \mu^{L_j} (\tilde{L}_n, P_n, T_n) - \mu^{v_j} (\tilde{V}_n, P_n, T_n) \quad (i=1,\ldots,c) \\ &\quad \textbf{ orégulation de niveau} \\ L_n &= K^R \left(V_n^{log} - V_n^{log x} + \frac{I^R}{\tau R} \right) \\ \frac{dI^R}{dt} &= v_n^{log} - V_n^{log x} \end{array}$$

Les inconnues sont

 \vec{N}_n , le vecteur des nombres de moles accumulées,

 \vec{L}_n , le vecteur des débits molaires partiels de liquide;

- V_n, le vecteur des débits molaires partiels de vapeur;
- U_n, l'énergie interne associée à l'étage;

Pn, la pression de l'équilibre thermodynamique;

- Tn, la température de l'équilibre thermodynamique;
- *ν*^{liq}_n, le volume de liquide dans le ballon;

I^R, le terme intégral du régulateur de niveau.

2.1.4 Modèle thermodynamique

Le modèle thermodynamique relie les compositions des phases liquide et vapeur, la température et la pression. Il permet en outre de calculer, en unités molaires, les énergies internes des phases, leurs enthalpies et leurs volumes. Enfin, il fournit les potentiels chimiques des composés du mélange dans les conditions de l'équilibre thermodynamique. Nous adoptons le modèle R.K.S. [120, 121, 101, 102] – du nom de ses auteurs, Reditch, Kwong et Soave-, qui est bien adapté aux mélanges d'hydrocarbures que nous traitons. Dans cette section, nous ne particularisons pas de plateau et notons T la température (K), P la pression (Pa). A chaque composé i est associé :

 ω^i , son coefficient a centrique de Pitzler; T^{C_A} , sa température critique; P^{C_A} , sa pression critique.

Les interactions entre les composés sont décrites par la matrice symétrique des coefficients d'interaction binaire $k^{i,j}$. Nous supposons que le modèle est valable aussi bien pour le liquide que pour la vapeur et notons génériquement $\zeta = (\zeta^i)^{i=1,\dots,c}$ la composition, soit du liquide, soit de la vapeur.

Le modèle R.K.S. est fondé sur une équation d'état explicite en pression

$$P = \frac{RT}{v - b} - \frac{a}{v(v + b)},$$

où

R est la constante des gaz parfaits;

v est le volume molaire;

- a est donné par

$$a = \sum_{i=1}^{c} \sum_{j=1}^{c} a^{ij} \zeta^{i} \zeta^{j}$$

avec

$$a^{i,j} = \sqrt{a^{i,i}a^{j,j}}(1 - k^{i,j})$$

 $^{\rm et}$

$$a^{i,i} = \frac{\left(RT^{C_{\delta}}\left(1 + (0.4851 + 1.5517\omega^{i} - 0.1516(\omega^{i})^{2}))\left(1 - \sqrt{\frac{T}{T^{C_{\delta}}}}\right)\right)\right)^{2}}{9P^{C_{\delta}}(2^{1/3} - 1)} \cdot$$

b est donné par

$$b = \sum_{i=1}^{c} \sum_{j=1}^{c} b^{i,j} \zeta^{i} \zeta^{j}$$

avec

$$b^{i,j} = \frac{b^{i,i} + b^{j,j}}{2}, \quad b^{i,i} = \frac{(2^{1/3} - 1)RT^{C,i}}{3P^{C,i}}.$$

Si l'on considère le facteur de compressibilité Z = Pv/RT, l'équation d'état devient

$$Z^3 - Z^2 + (A - B - B^2)Z - AB = 0,$$

où $A = aP/R^2T^2$ et B = bP/RT Cette équation cubique possède généralement plusieurs solutions. Pour la vapeur, il convient de prendre la plus grande racine, pour le liquide, la plus petite supérieure à B. Conservons la notation Z pour la racine ainsi choisie. Alors v = RTZ/Pet, pour i = 1,..., c, les coefficients de fugacité d' valent

$$\log \phi^{i} = 1 - Z - \log\left(\frac{P(v-b)}{RT}\right) + 2b^{i}\frac{Z-1}{b} - \frac{\log\left(\frac{v+b}{v}\right)}{bRT}\left(2a^{i} + a - \frac{2ab^{i}}{b}\right),$$

avec $a^i = \sum_{j=1}^c a^{i,j} \zeta^j$ et $b^i = \sum_{j=1}^c b^{i,j} \zeta^j$

Les potentiels chimiques sont donnés par

$$\mu^{i}(\vec{\zeta}, T, P) = g^{i}(T, P^{std}) + RT \log \left(\frac{P\phi^{i}\zeta^{i}}{P^{std}}\right),$$

où g^i est l'enthalpie libre molaire du composé i et P^{std} la pression standard. L'équilibre thermodynamique étant défini comme l'égalité des potentiels chimiques dans les deux phases, les valeurs de g^i et P^{std} on peu d'importance. Il est possible notamment de prendre $g^i = 0$ et $P^{std} = P$ L'enthalpie molaire s'obtient par

$$h(\vec{\zeta},T,P) = \left(T \left. \frac{\partial a}{\partial T} \right|_{\vec{\zeta}} - a \right) \frac{\log\left(\frac{v+b}{v}\right)}{b} + Pv - RT + \sum_{i=1}^{c} \zeta^{i} h^{ap,i}(T),$$

où h^{gp,i} est l'enthalpie molaire du gaz parfait associé au composé i. L'énergie molaire vaut alors

$$u(\vec{\zeta}, T, P) = h(\vec{\zeta}, T, P) - Pv(\vec{\zeta}, T, P).$$

2.1.5 Modèle hydrodynamique

Le modèle hydrodynamique permet d'exprimer à la fois la différence de pression entre deux étages superposés et le volume liquide de l'étage supérieur. Les équations et corrélations utilisées dépendent du type des plateaux : plateaux perforés, plateaux à clapets ... (voir par exemple [128]). Nous avons repris ici le modèle de Gallun et Holland [35]. Le liquide descend par gravité en chuant par dessus la jupe du déversoir situé sur l'un des cotés du plateau. La vapeur monte par différence de pression à travers les trous aménagés sur l'aire active du plateau supérieur. Ce mode de fonctionnement est illustré sur la figure 2.1.7, page 35.

La pression est définie à l'interface liquide-vapeur sur le plateau. Les hauteurs de liquide, dans les déversoirs et sur les plateaux, jouent un rôle important. Soit en effet un liquide de masse volumique ρ occupant un volume défini par sa hauteur z et la surface de sa base. Le poids du liquide implique que la pression à la base est supérieure à la pression au-dessus du liquide. Cette différence Δ égale ρ_{zg} , où g est l'accélération de la pesanteur. Pour un plateau de colonne.

- − le liquide sur la surface active est mélangé avec des builles de vapeur provenant du plateau inférieur. L'utilisation directe de la formule da = peg impliquerait une surestimation des variations de pression, due à la différence des masses volumiques des phases liquide et vapeur. Pour remédier à ce problème, la hauteur z est multipliée par un réel strictement inférieur à un, calculé par une loi d'aération;
- la hauteur de liquide au-dessus de la jupe est calculée par une loi de déversoir : elle est proportionnelle au débit volumique du liquide à la puissance 2/3.

Par ailleurs, il est nécessaire de prendre en compte l'effet des goulots d'étranglement rencontrés par les flux. Ils impliquent des variations de pression appelées pertes de charge, proportionnelles au carré des débits volumiques. La pression est supérieure en amont du goulot d'étranglement. Pour un plateau de colonne, ce phénomène a lieu en deux endroits :

au fond des déversoirs, pour les flux de liquide, car la surface y est plus faible qu'au niveau de la jupe;

- au niveau des trous des plateaux, pour les flux de vapeur.

Ces deux effets, poids du liquide et goulot d'étranglement, sont les seuls que nous prenons en compte. Nous négligeons notamment le poids de la vapeur. En suivant le trajet du liquide, du déversoir du plateau j jusqu'à l'interface liquide-vapeur du plateau j + 1, nous avons (les notations sont regroupées dans la section 2.1.7, page 30)

$$P_{j+1} - P_j = z_j \rho_j^{liq} g - \Delta_j^{d\ell v} - z_{j+1}^{estim \ell e} \rho_{j+1}^{liq} g$$

En suivant le trajet de la vapeur du plateau j + 1 au plateau j, nous obtenons

$$P_{j+1} - P_j = \Delta_j^{trous} + z_j^{estimée} \rho_j^{liq} g$$

Les pertes de charge valent

La hauteur estimée du liquide sur le plateau j s'écrit

$$z_j^{estimée} = (1-a)(z_j^{jupe} + z_j^{libre}),$$

où le coefficient a de la loi d'aération est donné par

$$a=\lambda^{a\dot{e}re}(\mathcal{V}_{j+1}\sqrt{\rho_{j+1}^{vap}}/A_{j}^{active})^{0,17.}$$
 ,

et la hauteur libre au-dessus de la jupe par la loi de déversoir

$$z_j^{libre} = \lambda^{libre} (\mathcal{L}_j / l_j^{dev})^{2/3}$$

Le volume de liquide est la somme des volumes de liquide sur le plateau et dans le déversoir ;

$$\nu_j^{liq} = z_j^{estimée} A_j^{active} + z_j A_j^{dév}$$

Le calcul des masses et des débits volumiques requiert la connaissance de températures, pressions et compositions :

$$\begin{cases}
\mathcal{L}_{j} = \mathcal{L}_{j}(L_{j}, T_{j}, P_{j}) \\
\mathcal{V}_{j} = \mathcal{V}_{j}(\vec{V}_{j}, T_{j}, P_{j}) \\
\rho_{j}^{liq} = \rho_{j}^{liq}(\vec{L}_{j}, T_{j}, P_{j}) \\
\rho_{i}^{liq} = \rho_{j}^{vap}(\vec{V}_{j}, T_{j}, P_{j}).
\end{cases}$$

Les équations donnant $P_{j+1} - P_j$ sur les trajets du liquide et de la vapeur sont donc implicites. Formellement

$$\begin{cases} P_{j+1} - P_j &= \Delta_j^{liq}(z_j, \vec{L}_j, T_j, P_j, \vec{L}_{j+1}, \vec{V}_{j+1}, T_{j+1}, P_{j+1}) \\ P_{j+1} - P_j &= \Delta_j^{uop}(\vec{L}_j, \vec{V}_j, T_j, P_j, \vec{V}_{j+1}, T_{j+1}, P_{j+1}) \\ \nu_i^{liq} &= \Upsilon_i^{liq}(z_j, \vec{L}_j, \vec{V}_j, T_j, P_j). \end{cases}$$

Nous ne décrivons pas ici l'extrapolation de ce modèle utilisée pour simuler les engorgements et les asséchements.

2.1.6 Modèle complet et commentaires

Le modèle algèbro-différentiel de la dynamique d'une colonne s'obtient en juxtaposant, à un modèle de ballon de tête et un modèle de ballon de fond, des modèles de plateaux. Le cas échéant, le modèle de plateau doit être légérement modifié, pour prendre en compte des souti rages ou des alimentations. La dimension différentielle d'un tel modèle, c'est à dire le nombre des équations différentielles qu'il comporte, égale n(e + 1) + 3 pour une colonne de n plateaux.

Revenons aux remarques préliminaires de la section. Ce modèle peut-il être résolu de façon correcte dans un simulateur? Si oui, dans quelle mesure les résultats obtenus sont-ils en accord avec la réalité?

Index et résolution numérique

Le modèle est inversible : ses variables algébriques sont exprimables en fonction de ses variables différentielles, les retenues de matière N_j et d'énergie U_j , plus les termes intégraux des régulateurs. Ceci signifie que, moyennant une condition initiale vérifiant les équations algébriques, la solution du système est unique puisque le champ de vecteur est régulier.

Par ailleurs, la partie différentielle étant explicite, le modèle est d'index 1 [31, 30, 98] ; sa résolution numérique par la méthode de Gar [45, 46, 47, 48] ne diverge pas. C'est cette méthode qui est mise en œuvre par le logiciel SPEEDUP (Proys' Technology [92]) que nous utilisons. Nos résultats de simulation sont donc fiables. Il reste à s'assurer que les phénomènes non-modélisés ne sont pas prépondérants pour les études qui nous intéresent.

• La description est-elle suffisante ?

Il va sans dire que ce modèle ne rend pas entièrement compte de la réalité d'une colonne. Nous avons supposé les plateaux totalement efficaces et passé sous silence les échanges de chaleur avec l'extérieur. Les phénomènes hydrodynamiques, tout comme les rebouilleurs récles, sont nettement plus complexes. Les shémas de condensation et de régulation offrent quant à eux une très grande diversité d'aspects : les installations locales et l'imagination des ingénieurs jouent là un rôle important.

Le problème de l'efficacité des plateaux nous semble le plus important mais est facilement résolu. Il suffit, en fonction de relevés réels, soit de modifier les équations du modèle (en introduisant par exemple une efficacité de Murphree), soit d'ajuster le nombre des plateaux théoriques.

Par contre, tenter de représenter finement les autres phénomènes est illusoire et conduirait rapidement, les utilisateurs les avent bien, à distingure les fonctionnements de jour et de nuit, en hiver ou en été (fuites thermiques, limitations physiques des aéro-réfrigérants...)! Le nombre des paramètres à incorporer au modèle serait forcément important et leur identification ou estimation une tâche très complexe, voire impossible. Tout cela pour un gain malgré tout modeste, une meilleure représentation de phénomènes rapides et stables, faiblement couplés avec la dynamique lent equi nous intéresse, celle des compositions. Nous nous satisfaisons donc de ce modèle qui donne, en statique, une bonne estimation des profils de compositions, de température et de penssion et reproduit fidélement en dynamique les constantes de temps de la ballons, caractéristiques thermodynamiques des composés, pression en tête de colonne, débits entrant et sortant (alimientation, distilla et résidu).

2.1.7 Notations

L'indice j rapporte au plateau j. Les plateaux sont numérotés du ballon de tête (plateau 1) au ballon de fond (plateau n). Les mélanges impliquent c composés.

o Notations du modèle de plateau, page 20

Rétentions

 \vec{N}_{i} , vecteur des nombres de moles N_{i}^{i} retenues sur le plateau;

U₁, énergie interne associée au plateau;

z₂, hauteur de liquide dans le déversoir;

Grandeurs thermodynamiques

P₂, pression d'équilibre, définie à l'interface liquide-vapeur;

T₁, température d'équilibre;

u^l et u^v, énergies molaires internes des phases liquide et vapeur ;

h^l et h^v, enthalpies molaires des phases liquide et vapeur;

 μ_j^{ls} et μ_j^{vs} , potentiels chimiques du composé i dans les phases liquide et vapeur – Débits

 $L_j,$ débit molaire liquide total quittant le plateau. Somme des éléments L_j^i du vecteur \vec{L}_j des débits molaires partiels de liquide quittant le plateau;

 V_j , débit molaire vapeur total quittant le plateau. Somme des éléments V'_j du vecteur $\vec{V_j}$ des débits molaires partiels de vapeur quittant le plateau;

Volumes

v^l et v^v, volumes molaires des phases liquide et vapeur;

 ν_{i}^{lag} , volume liquide sur le plateau;

 ν_{tot}^{tot} , volume total du plateau,

Notations supplémentaires pour le modèle de ballon de tête, page 22

Débits

D, débit de distillat;

 L_1 , débit de reflux (\vec{L}_1 est ici le vecteur des débits partiels de liquide refloués dans la colonne);

Q^{cond}, puissance de condensation;

Régulateurs

P₂^c, point de consigne du régulateur de pression,

I^{cond}, intégrale mesure-consigne du régulateur de pression;

Kcond, gain proportionnel du régulateur de pression;

 τ^{cond} , temps intégral du régulateur de pression;

 $\mathcal{V}_{1}^{liq,c}$, point de consigne du régulateur de niveau;

I^D, intégrale mesure-consigne du régulateur de niveau;

K^D, gain proportionnel du régulateur de niveau;

 τ^{D} , temps intégral du régulateur de niveau;

- Divers

ϵ, valeur à laquelle est restreint le distillat vapeur total;

 Δ^{cond} , perte de charge dans le condenseur;

Notations supplémentaires pour le modèle de ballon de fond, page 24
- Qrebo, puissance de rebouillage;
- Régulateur de niveau
 - $\mathcal{V}_{n}^{liq,c}$, point de consigne; I^{R} , intégrale mesure-consigne; K^{R} , gain proportionnel;
 - τ^R , temps intégral,

Notations du modèle thermodynamique, page 26

Energies

g^s, enthalpie libre molaires du composé i;

- h, enthalpie molaire;
- h^{gp,s}, enthalpie molaire du gaz parfait associé au composé i;
- u, énergie molaire;
- µⁱ, potentiel chimique du composé i;
- Pressions
 - P, pression de l'équilibre thermodynamique;
 - P^{C,i}, pression critique du composé i;
 - P^{std}, pression standard;
- Températures
 - T, température de l'équilibre thermodynamique;
 - $T^{C,i}$, température critique du composé i;
- Paramètres du modèle
 - w', coefficient acentrique de Pitzler du composé i;
 - k'', coefficient d'interaction entre les composés i et j;
 - a, variable de l'équation d'état;
 - a^a, variable pour le calcul des fugacités;
 - a^{1,1}, variable intervenant dans les calculs de a et a¹,
 - b, variable de l'équation d'état;
 - b², variable pour le calcul des fugacités;
 - b^{1,1}, variable intervenant dans les calculs de a et a¹;
- Divers
 - ϕ^{i} , fugacité du composé *i*;
 - ζ, composition (liquide ou vapeur);
 - v, volume molaire;
 - Z, facteur de compressibilité;
 - A et B, réels intervenant dans l'équation de la cubique en Z,
 - R, constante des gaz parfaits;

Notations du modèle hydrodynamique, page 27

Aires

 A_j^{states} aire active du plateau; A_j^{det} , aire du déversoir; A_j^{ded} , aire disponible en fond de déversoir pour le passage du liquide sur le plateau j+1;

A^{trous}, aire totale des trous sur la surface active;

- Hauteurs

z, hauteur du liquide dans le déversoir;

z^{estimée}, hauteur équivalente du liquide sur le plateau;

z^{jupe}, hauteur de la jupe du déversoir;

zlibre, hauteur au-dessus de la jupe du déversoir;

Pertes de charge

 $\Delta^{d \acute{e} v}$, fonction pertes de charge dues aux déversoirs,

 Δ^{trous} , fonction pertes de charge dues aux trous;

Coefficients de corrélation

 λ^{abre} , loi d'aération;

 $\lambda^{d\ell v}$, pertes de charge dues aux déversoirs;

 λ^{hbre} , loi de déversoir;

 λ^{trous} , pertes de charge dues aux trous;

- Volumes

 Υ_{i}^{liq} , fonction volume liquide sur le plateau;

 \mathcal{V}_{*}^{liq} , volume liquide sur le plateau;

 \mathcal{V}_{*}^{tot} , volume total du plateau;

Grandeurs volumiques

L₁, débit volumique de liquide;

V₂, débit volumique de vapeur;

 ρ_{i}^{liq} , masse volumique du liquide;

 ρ_1^{vap} , masse volumique de la vapeur;

Débits molaires partiels

 \vec{L}_{j} , vecteur des débits molaires partiels de liquide;

 $\vec{V_j}$, vecteur des débits molaires partiels de vapeur;

Grandeurs thermodynamiques

 P_j , pression;

T₂, température;

- Divers

a, loi de déversoir, g, accélération de la pesanteur.

l^{dév}, largeur du déversoir.



Figure 2.1: Notations du modèle hydrodynamique

2.2 Le modèle (L,V)

Dénommé "constant molal overflow model" dans la littérature anglo-saxonne, le modèle (L, V)est couramment utilisé par la plupart des chercheurs impliqués dans la commande des colonnes à distiller. Avant l'avénement de l'informatique, il avait aussi une importance considérable pour la conception des unités. Cette section est consacrée au détail des hypothèses nécessaires pour l'établir.

2.2.1 Etablissement du modèle (L,V)

Le modèle (L,V) se caractérise par l'égalité, pour chacune des phases, des débits molaires totaux entrant et sortant. Cette propriété découle d'hypothèses sur les énergies associées aux constituants, parfois appelées hypothèses de Lewis.

Les hypothèses utilisées à la section précédente concernant les équilibres thermodynamiques (mélanges parfaits, équilibres idéaux) et les plateaux sont toujours utilisées ici. Le volume total de chaque plateau est donc constant.

Hypothèse 1 La pression sur chacun des plateaux est constante.

Cette hypothèse implique l'abandon du modèle hydrodynamique, qui relie la différence de pression entre deux plateaux aux flux. Comme le volume (par construction de la colonne) et la pression sur chaque plateau sont constants, la variation d'énergie se réduit à la variation d'enthalpie.

Adoptons les notations suivantes :

- l'indice rapporte au numéro de plateau dans la colonne (les plateaux sont numérotés de haut en bas);
- c est le nombre des constituants du mélange;

L, est le débit liquide total quittant le plateau j;

- V₁ est le débit vapeur total quittant le plateau j;
- X_j est le vecteur des fractions molaires dans le liquide : $X_j = (x_j^1, \dots, x_j^c)^t$ Par définition,

$$\sum_{i=1}^{c} x^{i} = 1;$$

 Y_j est le vecteur des fractions molaires dans la vapeur : $Y_j = (y_j^1, \dots, y_j^c)^t$ Par définition,

$$\sum_{i=1}^{c} y^{i} = 1;$$

- H¹_i et H^v_i sont les retenues ("holdups") molaires liquide et vapeur sur le plateau j,;
- h^l₁ et h^v₂ sont les enthalpies molaires liquide et vapeur;
- h^{p,i}_i est l'enthalpie molaire partielle du constituant i dans la phase p, p valant soit l, soit v

$$h_{j}^{l} = \sum_{i=1}^{c} h_{j}^{l,i} x_{j}^{i}$$
 et $h_{j}^{v} = \sum_{i=1}^{c} h_{j}^{v,i} y_{j}^{i}$;

 Δh^i est l'enthalpie molaire partielle de vaporisation du constituant *i*.

Les bilans de matière et d'énergie s'écrivent pour un plateau

$$\begin{cases} \frac{d}{dt}(H_j^l X_j + H_j^l Y_j) &= L_{j-1}X_{j-1} + V_{j+1}Y_{j+1} - L_jX_j - V_jY_j \\ \frac{d}{dt}(H_j^l h_j^l + H_j^v h_j^v) &= L_{j-1}h_{j-1}^L + V_{j+1}h_{j+1}^v - L_jh_j^l - V_jh_j^v \end{cases}$$

Hypothèse 2 [Hypothèses de Lewis] Pour chaque constituant et dans chaque phase, l'enthalpie molaire partielle est indépendante de la pression, de la température et de la composition.

Autrement dit, l'enthalpie molaire partielle d'un constituant est constante dans chaque phase, quel que soit le plateau considéré.

Sous cette hypothèse, le bilan d'énergie se réécrit

$$\frac{d}{dt}(H_j^l h_j^l + H_j^v h_j^v) = \sum_{i=1}^c h^{l,i}(L_{j-1}x_{j-1}^i - L_j x_j^i) + \sum_{i=1}^c h^{v,i}(V_{j+1}y_{j+1}^i - V_j y_j^i),$$

où h^{i,i} et h^{v,i} réprésentent les enthalpies molaires partielles liquide et vapeur du constituant i, indépendamment du plateau considéré.

En utilisant le bilan matière dans cette dernière expression, nous tirons

$$\frac{d}{dt}(H_j^l h_j^l + H_j^v h_j^v) - \sum_{i=1}^c h^{v,i} \frac{d}{dt}(H_j^l x_j + H_j^l y_j) = \sum_{i=1}^c \Delta h^i (V_{j+1} y_{j+1}^i - V_j y_j^i),$$

où Δh^i réprésente l'enthalpie molaire partielle de vaporisation du constituant i, indépendamment du plateau considéré.

Hypothèse 3 Les enthalpies molaires partielles de vaporisation sont identiques pour tous les composés.

En statique En utilisant le fait que $\sum_{i=1}^{c} x^{i} = 1$, $\sum_{i=1}^{c} y^{i} = 1$, nous obtenons

$$V_{j+1} = V_j$$
.

Par un bilan matière global, nous en déduisons

$$L_{j-1} = L_j$$
.

En dynamique Grâce à l'hypothèse 2, les résultats obtenus en statique sont valables en dynamique dès lors que,

Hypothèse 4 Les retenues molaires liquides sur les plateaux sont constantes.

Notons qu'en utilisant un changement de coordonnées pour les fractions molaires, il est possible de se passer de l'hypothèse 3 pour obtenir l'égalité de flux d'énergie entrant et sortant. Ces calculs sont exposés dans la thèse d'Albaret [2].

2.2.2 Ecriture du modèle (L,V)

Rappel des hypothèses et des notations

Hypothèses thermodynamiques

Le liquide et la vapeur sont, sur chaque plateau, homogènes et à l'équilibre thermodynamique;

 Les enthalpies molaires partielles des constituants sont indépendantes de la pression, de la température et de la composition;

Les enthalpies molaires partielles de vaporisation de tous les constituants sont identiques.

les équilibres liquide-vapeur sont tels que, si un composé est absent d'une phase, alors il est absent de l'autre phase.

Hypothèses sur la colonne

la pression sur chaque plateau est constante;

la retenue molaire liquide sur chaque plateau est constante;

- la retenue molaire vapeur sur chaque plateau est négligeable;
- les parois des plateaux sont adiabatiques;

la condensation des vapeurs de tête est totale;

- le débit d'alimentation, le distillat et le résidu sont toujours strictement positifs.

Notations

Les plateaux sont numérotés du haut vers le bas, du plateau l (ballon de tête) au plateau n(ballon de fond). Les variables se rapportant au plateau j sont repérées par l'indice j. La séparation implique c composés. L est le débit de reflux;

V est le débit de vapeur généré en fond de colonne;

F est le débit d'alimentation, z sa composition. L'alimentation entre au plateau f;

H_i est la retenue molaire liquide sur le plateau j;

- x, est le vecteur des fractions molaires dans le liquide sur le plateau j. La somme des fractions molaires dans le liquide égale un. Cette propriété est intégrée dans la définition de x,, qui est de dimension (c − 1) : x_j = (x_j¹,...,x_jⁿ⁻¹)¹;
- k est la fonction d'équilibre liquide vapeur. k(x) est le vecteur, de dimension (c 1), des fractions molaires dans la vapeur sur le plateau j. Nous ne rappelons pas la dépendance en la pression de k pour alléger les notations. Si x, est un scalaire (cas binaire), cette fonction est croissante et vérifie k(0) = 0 et k(1) = 1 (cas égalités sont directement liées à la dernière des hypothèses thermdoynamiques). Dans le cas multicomposé, ess propriéts sont mal connues, mais un résultat concernant son jacobien est présenté dans l'annexe B, page 159. Nous l'utiliserons par la suite.

Description

Sous les hypothèses et avec les notations de la section précédente, le modèle (L,V) s'écrit

$$\begin{array}{rcl} H_{1} \frac{dx_{1}}{dt} &= V(k(x_{2}) - x_{1}) \\ & \cdot \\ H_{1} \frac{dx_{1}}{dt} &= L(x_{t-1} - x_{t}) + V(k(x_{t+1}) - k(x_{t})) & (i = 2 \ \& f - 1) \\ & \cdot \\ H_{f} \frac{dx_{f}}{dt} &= L(x_{f-1} - x_{f}) + V(k(x_{f+1}) - k(x_{f})) + F(z - x_{f}) \\ & \cdot \\ H_{i} \frac{dx_{i}}{dt} &= (L + F)(x_{i-1} - x_{i}) + V(k(x_{i+1}) - k(x_{i})) & (i = f + 1 \ \& n - 1) \\ & \cdot \\ H_{n} \frac{dx_{n}}{dt} &= (L + F)(x_{n-1} - x_{n}) + V(x_{n} - k(x_{n})) \end{array}$$

Chapitre 3

Propriétés du flot et points stationnaires

Le but de ce chapitre et des deux suivants est l'étude qualitative de l'équation différentielle sont importantes car elles permettent une meilleure compréhension du procédé, précieuse lors de la synthèse de lois de commande. Nous commençons par exposer deux propriétés démontrables indépendamment du nombre des composés intervenant dans les melanges : le fot existe pour des temps non bornés et admet au moins un point fixe. Nous discutons ensuite de l'unicité de ce zéro du champ de vecteurs. Il nous faut là distinguer entre les colonnes binaires et les colonnes multicomposées. Pour les premières, l'unicité du zéro est démontrable, ce qui n'est partiels valides soit pour des flashes (vu comme des colonnes à un seul plateau), soit pour des systèmes sans alimentation intermédiaire, formés de plusieurs plateaux et d'une extrémité de colonne.

Dans toute la suite de ce mémoire, nous nous plaçons sous les hypothèses suivantes

– les débits L, V, F, (V - L) –distillat– et (L + F - V) –résidu– sont strictement positifs

3.1 Existence de trajectoires pour des temps non bornés. Dépendance paramétrique.

Lemme 1 Pour toute condition initiale appartenant au compact $K = [0, 1]^{n(c-1)}$, le système (2.1) admet, indépendamment de la valeur des paramètres L, V, F et z, une solution prolongeable en temps jusqu'à l'infini.

Preuve Par la régularité du champ de vecteur, une solution unique existe pour des temps suffisamment petits. Il nous suffit de montrer que le champ de vecteurs associé au système

 $⁻z \in [0, 1]^{c-1}$

est rentrant sur le bord ∂K de K. Dans ces conditions, le théorème de prolongement sur un compact [3] s'applique et fournit directement le résultat. Soit donc $x \in \partial K$. Il existe alors au moins un x'_i tel que $x'_i = 0$ ou $x'_i = 1$:

si $x_j^i = 0$, il est clair d'après les équations de (2.1) que $\frac{\partial x_j^i}{dt} \ge 0$;

de la même manière, si $x_j^i = 1$, $\frac{\partial x_j^i}{dt} \le 0$.

Ainsi, le champ est rentrant sur ∂K et le résultat suit.

3.2 Existence d'au moins un point stationnaire

Lemme 2 Le système décrit par le modèle (L, V) admet au moins un point stationnaire dans le compact $K = [0, 1]^{n(c-1)}$

Preuve Cette propriété découle directement du théorème suivant (voir [61], page 118), qui est une forme équivalente du théorème de Brouwer [82, 61].

Théorème 1 Soit D_n le fermé borné de \mathbb{R}^n

 $D_n = \prod_{i=1}^n [a_i, b_i] \quad (-\infty < a_i < b_i < +\infty).$

Soit n applications continues $f_i : D_n \longrightarrow R$ telles que, pour tout $i \in \{1, n\}$

 $\begin{cases} f_i(\zeta_1, \dots, \zeta_{i-1}, a_i, \zeta_{i+1}, \dots, \zeta_n) \geq 0\\ f_i(\zeta_1, \dots, \zeta_{i-1}, b_i, \zeta_{i+1}, \dots, \zeta_n) \leq 0 \end{cases}$

Alors, il existe $\bar{\zeta}$ appartenant à D_n tel que $f_i(\bar{\zeta}) = 0$ pour tout $i \in \{1, n\}$

La démonstration de la propriété précédente montre que le champ de vecteurs du système (2.1) vérifie les hypothèses de ce théorème pour $a_i = 0$, $b_i = 1$ quel que soit i et le résultat suit.

3.3 Unicité du point stationnaire

La question de l'unicité du point stationnaire est importante :

d'un point de vue théorique, l'unicité permet notamment de garantir l'unicité de la solution de divers problèmes d'inversion intervenant dans des algorithmes de commande.

- d'un point de vue pratique, l'existence de points stationnaires multiples impliquerait une étude de leurs bassins d'attraction respectifs pour éviter de brusques variations du mode de fonctionnement. Ce phénomène aurait aussi des conséquences sur les méthodes de calcul des unités. Tout d'abord, rappelons qu'il existe au moins un point stationnaire. L'unicité est ains un problème bien posé. Plusieurs auteurs ont récemment rapporté l'observation en simulation de points stationnaires multiples pour certains modèles de distillation. Nous en discutons brièvement : ces travaux ne sont pas concluants dans le cadre d'un équilibre thermodynamique cas binaique où interviennet une phase vapeur et une seule phase liquié. Nous traitons à part le cas binaire pour lequel l'unicité est facilement démontrable. Pour les colonnes multicomposées, nous mentionnons quelques résultats partiels connaire d'un modèle (LyV) multicomposé.

3.3.1 Des points stationnaires multiples observés en simulation

Depuis les travaux originaux de Magnussen et al en 1979 [78], divers auteurs ont observé en simulation l'existence de points stationnaires multiples pour des modèles de distillation [66, 91, 133]. On peut émettre des réserves sur les méthodes employées. En effet, les équilibres thermodynamiques étant calculés par minimisation, il convient de s'assurer que l'algorithme utilisé conduit bien à un minimium global. Cet aspect n'est pas abordé dans les publications que nous mentionnons. Cependant, un point commun à ces études doit être relevé : tous les cas présentés impliquent

- ou des mélanges azéotropiques (c'est à dire des mélanges pour lesquels les phases liquide et vapeur peuvent être de compositions identiques);
- ou une seconde phase liquide;
- ou des équilibres thermodynamiques non-idéaux.

Ce problème de multiplicité des points stationnaires n'est pas encore très bien compris. Doherty et Perkins [24] font remarquer qu'aucune observation sur un site industriel n'a été rapportée. L'hypothèse d'un problème numérique n'est donc pas à exclure, mème si Sridhar et Lucia [122, 123] ont insisté récemment sur l'importance de la stabilité de l'équilibre liquidevapeur pour leurs études des points stationnaires de modèles de distillation. Quoiqu'il en soit, nous ne nous intéressons ici qu'à des mélanges zéotropiques dans des conditions d'équilher liquide-vapeur idéal et stable. A notre connaissance, il n'a été mentionné pour ceux-ci aucun comportement semblable, tant d'un point de vue théorique que pratique. Au moins sous ces hypothèses thermodynamiques, il est donc légitime de tenter de démontrer l'unicité du point stationnaire des modèles (L/V).

3.3.2 Colonne binaire

Lemme 3 Dans le cas binaire, le système (2.1) admet un point stationnaire unique dans [0, 1]ⁿ

Preuve Rappelons que $\frac{\partial k}{\partial x}$ est un scalaire strictement positif (annexe B, page 159) et que k(x) est une bijection de [0, 1] dans [0, 1].

- Etape 1 Montrons par récurrence l'assertion suivante : la composition x₁ est reliée par des difféomorphismes croissants sur [0, 1] aux compositions sur les plateaux 2 à f
 - l'assertion est vraie pour x_2 . En effet, au point stationnaire, $k(x_2) = x_1$ et $\frac{\partial k}{\partial x}$ est positif.
 - notons r = L/V et y₁ = k(x₁). Comme le débit de distillat V L est supposé strictement positif, 0 < r < 1. Supposons que l'assertion soit vraie pour le plateau et démontrons qu'alors elle est vraie pour le plateau j + 1. Au point stationnaire :

$$y_{j+1} = (1 - r)y_2 + rx_j(x_1),$$

soit

$$\frac{\partial y_{j+1}}{\partial x_1} = (1 - r) + r \frac{\partial x_j}{\partial y_j} \frac{\partial y_j}{\partial x_1}$$

Ce scalaire est positif et l'assertion est démontrée, puisque $(1 - r)y_2 + rx_j(x_1)$ appartient à [0, 1]

- Etape 2 De la même façon, il est possible de démontrer que la composition x_n est reliée par des difféomorphismes croissants sur [0, 1] aux compositions sur les plateaux n - 1 à f
- Etape 3 Par un bilan matière global, nous obtenons :

$$z = \frac{V-L}{F}x_1 + \frac{L+F-V}{F}x_n = \frac{V-L}{F}\varphi_1(x_f) + \frac{L+F-V}{F}\varphi_n(x_f),$$

où $z \in [0, 1]$ et φ_1 et φ_n sont des difféomorphismes croissants sur [0, 1]. Par un argument du même type que celui de l'étape 1, z est difféomorphe à x_f et donc à tous les x_j . Le point stationnaire est unique et appartient à $[0, 1]^n$

Profil de composition au point stationnaire :

Lemme 4 Si l'état x du modèle (L, V) représente le composé lourd $(k(x_j) < x_j, \forall x_j \in]0, 1[)$, alors, au point stationnaire :

$$0 < x_1 < x_2 < \cdots < x_{n-1} < x_n < 1.$$

La preuve découle directement de l'expression du champ de vecteur.

3.3.3 Colonne multicomposée

Nous savons déjà qu'un modèle (L.V) multicomposé admet un point stationnaire. Nous savons de plus que, sous l'hypothèse d'équilibre thermodynamique liquide-vapeur idéal et stable de mélanges zéotropiques, l'existence de points stationnaires multiples n'a été observée ni en simulation ni sur un site industriel. Se fondant sur la propriété d'unicité du point stationnaire pour les modèles (L.V) binaires, les efforts portent sur la question suivante.

Si:

- l'équilibre thermodynamique est idéal et implique l'existence d'une phase vapeur et d'une unique phase liquide quel que soit le plateau considéré;
- il n'existe pas d'azéotropes pour les compositions rencontrées dans la colonne (distillation zéotropique),

le modèle (L,V) d'une colonne multicomposée admet-il un point stationnaire unique?

A notre connaissance, cette question n'est pas résolue. Quelques résultats partiels existent, que nous mentionnons avant de décrire deux approches qui n'ont pour l'instant pas abouti.

Rappel de résultats partiels

Lemme 5 Soit un plateau alimenté par un flux de liquide (de débit molaire L et de composition x_0) et un flux de vapeur (de débit molaire V et de composition y_1). Si x_1 est le vecteur des fractions molaires dans le liquide et $k(x_1)$ celui des fractions molaires dans la vapeur, le modèle (LV) du plateau,

$$\frac{dx_1}{dt} = L(x_0 - x_1) + V(y_2 - k(x_1)),$$

admet un point stationnaire unique.

La démonstration est simple. Elle est basée sur la théorie du degré [73]. Comme $\partial k/\partial x_1$ est une matrice diagonalisable à valeurs propres réelles, distinctes et positives (voir l'annexe B), l'application

$$\varphi(x_1) = \frac{L}{V}x_1 + k(x_1)$$

n'est pas dégénérée. Par ailleurs, elle envoie le bord de $[0, 1]^{c-1}$ sur le bord de $[0, 1 + L/V]^{c-1}$ Il est possible de construire une homotopie, n'admettant aucun point critique, qui transforme cette application en l'identité. Comme l'identité est de degré 1, notre application est aussi de degré 1 el te résultat suit.

Ce résultat n'est pas adaptable au cas de plusieurs plateaux. Face à ces difficultés, il est utilié de simplifier le problème en posant de nouvelles hypothèses. Parmi ces demières, l'hypothèse des volatilités relatives constantes est classique. Soit un mélange de c constituants. A l'équilibre thermodynamique, les phases liquide et vapeur sont caractérisées par leurs compositions respectives $x = (x^i) \cdot x^{(i)}$ et $y = (y^i) \cdot ...y^{(i)}$. La volatilité du composé i est, par définition, le rapport y'/x^i . Sa volatilité relative α^i est définie par rapport à un constituant de référence, noté 1 ici. Elle vaut

$$\alpha^{i} = \frac{y^{i}x^{1}}{x^{i}y^{1}}$$

La relation d'équilibre liquide-vapeur s'écrit alors pour chaque composé

$$y^{i} = k^{i}(x) = \frac{\alpha^{i}x^{i}}{1 + \sum_{k=2}^{c}(\alpha^{k} - 1)x^{k}}$$

En utilisant cette hypothèse, il est possible de démontrer le résultat suivant.

Lemme 6 [Canon] Le point stationnaire du modèle (L, V) des systèmes (tête de colonne+section en rectification) et (section en épuisement+fond de colonne), où les sections s'entendent sans alimentation intermédiaire, est unique si les volatilités relatives sont constantes sur chaque pateau.

Nous ne rappelons pas ici la démonstration, très technique, présentée par Canon dans sa thèse [8]. Son résultat concerne en fait l'inversion de relations intervenant pour la distillation batch mais se reformule dans les termes du lemme ci-dessus. Il n'est extensible, ni au cas d'une section de plateau, même sans alimentation intermédiaire, ni au cas d'une colonne.

On le voit, ce résultat n'apporte pas de réponse satisfaisante à la question posée. Les tentatives que nous décrivons maintenant sont elles-aussi infructueuses.

Technique de type point fixe

C'est la voie suivie par Lucia et Sridhar [74, 122, 123]. Ils ne s'intéressent pas uniquement au modèle (L,V), qui est cependant inclus dans la classe des modèles abordés. Leurs travaux ont pour origine l'étude d'un flash isobare et isobherme, qui peut être modélisé par le système

 $\begin{cases} \mu^{l} - \mu^{v} = 0 & (\text{équilibre thermodynamique}) \\ f' - l^{v} - v^{i} = 0 & ;i = 1, \dots, c & (\text{bilan matière}) \\ FH^{f} - LH^{l} - VH^{v} + Q = 0 & (\text{bilan énergétique}) \\ \sum_{i=1}^{i} l^{v} = L & \\ \sum_{i=1}^{c} v^{i} = V & \\ \sum_{i=1}^{c} f^{i} = F & \\ l = (l^{i}, \dots, l^{i})^{i} & \\ v = (v^{j}, \dots, v^{c})^{i} & \\ f = (f^{j}, \dots, f^{c})^{i} & \end{cases}$

où

L, V sont les débits molaires liquide et vapeur sortant et F le débit molaire d'alimentation -

les lⁱ sont les débits molaires partiels du liquide sortant, pour chaque composé i de 1 à c.
 Les flux molaires partiels associés à V et F sont, de manière similaire, les vⁱ et les fⁱ;

 μ^{l} et μ^{v} sont les potentiels chimiques associés à la phase liquide (l) et à la phase vapeur (v);

H^l, H^v et H^f sont les enthalpies associées aux flux L, V et F;

Q est l'énergie apportée au ballon de flash sous forme de chaleur.

En dérivant la première équation pour faire apparaître les dérivées secondes des énergies libres G^{t} et G^{v} , on obtient les égalités suivantes :

$$\begin{cases} Dv = (D^2G^l + D^2G^v)^{-1}D^2G^l.Df = M.Df \\ Dl = (D^2G^l + D^2G^v)^{-1}D^2G^v.Df = (I - M).Df \end{cases}$$

Grâce aux relations de Gibbs-Duhem, il est possible de montrer que les valeurs propres de Met de I - M appartiennent au segment [0, 1].

La colonne est ensuite considérée comme un empilement de flashes, alimentés chacun par le flux de vapeur du flash situé en-dessous et le flux de liquide du flash situé au-dessus. Il est possible d'écrire, pour chaque plateau j,

$$\begin{cases} Dv_j = M_j.(Dv_{j+1} + Dl_{i-1}) \\ Dl_j = (I - M_j).(Dv_{j+1} + Dl_{i-1}) \end{cases},$$

où M_j est définie de la même façon que M. Sridhar et Lucia définissent à partir de ces relations l'application

$$X^{k+1} = \varphi(X^k),$$

où X est le vecteur des flux partiels y, Dans le cas binaire, à partir des propriétés des mairices M_i, ils montrent que cette application y est contractante. Il s'agit ensuite d'étudier le cas plus réaliste isobare et adiabatique. Ces auteurs cherchent à définir des chemins réguliers qui permettent, en conservant l'unicité du point stationnaire, de déplacer la solution du problème isobare et adiabatique. Dans le cas multicomposé, leurs recherches n'ont pas encore abouti à la démonstration de la propriété qui nous préoccupe.

Généralisation directe de la démonstration dans le cas binaire

C'est la voie suivie par Albaret [2]. Les étapes de la démonstration sont identiques à celles du cas binàre. Il s'agit de construire des difféomorphismes de S dans S, S étant le simplexe dans lequel évoluent les compositions. Toute la difficulté provient du fait que la dimension de S est is strictement supérieure à un. La démarche est la suivante :

Supposons connues les compositions du distillat et du résidu. Les débits L, V et F, ainsi la composition z, sont fixés.

 Démontrons que les compositions sur les plateaux 2 à f sont difféomorphes à la composition du distillat.

(2) Démontrons que les compositions sur les plateaux f à n − 1 sont difféomorphes à la composition du résidu. (3) Utilisons un bilan matière global pour relier la composition de la charge aux compositions du distillat et du résidu.

(4) Transformons ce bilan matière grâce aux difféomorphismes précédents : la composition de la charge est alors reliée à la composition sur le plateau d'alimentation.

(5) Pour conclure, démontrons que cette dernière relation définit aussi un difféomorphisme.

Alors, quand la composition de la charge est fixée, la composition sur le plateau d'alimentation et donc l'ensemble des compositions est défini de manière unique.

Cette approche échoue dès le point (1). En effet, en notant r le ratio L/V, nous pouvons écrire pour la zone de rectification

$$y_{i+1} = k(x_{i+1}) = (1 - r)x_1 + rx_i$$
.

Nous savons que $\frac{\partial k}{\partial t}$ est représenté par une matrice a valeurs propres réelles strictement positives (voir l'annexe B, page 159).

Démontrons que $y_3 = k(x_3)$ est difféomorphe à x_1 . Au point stationnaire, $y_2 = x_1$, donc

$$y_3 = (1 - r)y_2 + rx_2$$
.

Alors

$$\frac{\partial y_3}{\partial y_2} = (1 - r)I + r \frac{\partial k^{-1}}{\partial y_2}$$

est à valeurs propres réelles strictement positives, soit de déterminant non nul et le résultat suit.

Supposons maintenant que x_i est difféomorphe à y_2 et tentons de démontrer que x_{i+1} est difféomorphe à y_2 . Il faut que la matrice

$$\frac{\partial y_{i+1}}{\partial y_2} = (1 - r)I + r\left(\frac{\partial k^{-1}}{\partial y_i}\right)\left(\frac{\partial y_i}{\partial y_2}\right)$$

ait un déterminant non nul. Or il est impossible de caractériser les valeurs propres du produit $\left(\frac{\partial k^{-1}}{\partial y_i}\right)\left(\frac{\partial y_i}{\partial y_2}\right)$. En conséquence, même si le déterminant de ce produit est forcément non nul, nous ne pouvons pas affirmer que l'homotopie

$$H$$
: $[0, 1] \times S \rightarrow S$
 $H(t, y_2) = (1 - t)y_2 + tx_i(y_2)$

n'admet aucun point critique quand t varie de l λ r. Le même problème se pose pour la section d'épuisement. Sans hypothèse supplémentaire sur la thermodynamique [2], ce type de technique ne peut pas aboutir au résultat souhaité.

Pour clore ce chapitre, notons que nous démontrerons au chapitre 5 l'unicité du point stationnaire pour un modèle simplifié de la dynamique d'une classe de colonnes multicomposées, les colonnes pseudo-binaires, qui peuvent être vues comme une perturbation du cas binaire.

Chapitre 4

Stabilité

Nous nous intéressons dans ce bref chapitre à la stabilité en boucle ouverte des modèles (L,V). Là encore, une dichotomie s'impose entre les colonnes binaires et les colonnes multicomposées. Rosenbrock a montré en 1962 [95, 96, 97] que les premières étaient stables. Pour les secondes, quelques résultat très partiels existent. Ce chapitre s'articule donc naturellement en deux parties. Dans un premier temps, nous rappelons le résultat de Rosenbrock et affinons la description du point stationnait très partiels existent. Ce chapitre s'articule donc naturellement en deux pargente. Nous abonirde des modèles de colonnes binaires par une étude de l'approximation tangente. Nous abonirde es colonnes multicomposées pour lesquelles es ulu n résultat sur le flash existe. Il découle d'un résultat beaucoup plus général sur la stabilité des flashes, étabil par P. Rouchon. L'annex A, page 147, expose ce résultat e l'étend en présentant une nou velle interprétation géométrique de la dynamique : c'est un système gradient sur une variété riemannienne pour laquelle la métrique découle de l'entropie.

4.1 Colonnes binaires

4.1.1 Stabilité de la dynamique

Lemme 7 [Rosenbrock] Dans le cas binaire, la dynamique du système décrit par le modèle (L,V) est globalement asymptotiquement stable si

- F, L et V sont strictement positifs;
- V L, L + F V, soit respectivement les débits de distillat et de résidu, sont strictement positifs.

Preuve Un théorème de Rosenbrock, rappelé dans l'annexe D.2, page 167, donne des conditions suffisantes pour que le système

$$\frac{d\zeta}{dt} = f(\zeta),$$

où $f(\zeta) = (f_j(\zeta))^{j=1,...,n}$, admette pour fonction de Lyapunov

$$V(\zeta) = \sum_{j=1}^{n} |f_{j}(\zeta)|.$$

On peut montrer (voir par exemple la thèse de Rouchon [98]) que le modèle (L,V) binaire remplit ces conditions lorsque les débits internes (L et V) et externes (F, V - L, L + F - V) sont strictement positifs. La fonction de Lyapunov du système est alors

$$W = \sum_{j=1}^{n} H_j \left| \frac{dx_j}{dt} \right|$$

Le système est globalement asymptotiquement stable.

4.1.2 Etude du linéarisé tangent

Lemme 8 Soit

$$\frac{d(\delta x)}{dt} = A\delta x + B\delta u \quad (\delta x \in R)$$

l'approximation linéaire tangente du système (2.1) pour c = 2. Alors, la matrice A a les propriétés suivantes :

A a n valeurs propres réelles, négatives et distinctes

$$0 > \lambda_1 > \lambda_2 > \cdots > \lambda_j > \cdots > \lambda_{n-1} > \lambda_n$$
;

Le vecteur propre v, associé à la valeur propre λ_j présente j - 1 changements de signe entre ses coordonnées successives. Par exemple,

 $\begin{array}{l} {\rm signe}(v_1) &= (--\cdots --) \\ {\rm signe}(v_3) &= (--\cdots ++\cdots ++) \\ {\rm signe}(v_3) &= (--\cdots ++\cdots ++) \\ \vdots \\ {\rm signe}(v_n) &= (-+-+\cdots -+-+\cdots ++) \end{array}$

Notamment, les coordonnées du vecteur propre correspondant à λ_1 sont toutes non nulles et de même signe.

Le premier point de ce lemme caractérise plus précisément le portrait de phases au voisinage du point stationnaire : c'est un cœud et non un foyer. Le second point est lié à l'invariance des espaces dx/dt > 0 et dx/dt < 0 sur le modèle non-linéaire. Preuve Elle est basée sur la forme de A, grâce à laquelle il est possible d'adapter certaines propriétés des matrices oscillatoires (voir [37], page 98).

Le calcul de l'approximation linéaire tangente donne pour A

$$\begin{array}{c} \frac{-V}{H_1} & \frac{V}{H_1} & \frac{\delta \phi}{\delta \sigma} \Big|_{\sigma_2} \\ \frac{L}{H_2} & -\frac{1}{H_2} (L + V & \frac{\delta \phi}{\delta \sigma} \Big|_{\sigma_2}) & \frac{V}{H_2} & \frac{\delta \phi}{\delta \sigma} \Big|_{\sigma_2} \\ \\ \frac{L + F}{H_{n-1}} & \frac{1}{H_{n-1}} (L + F + V & \frac{\delta h}{\delta \sigma} \Big|_{\sigma_{n-1}}) & \frac{V - \frac{\delta h}{\delta \sigma} \Big|_{\sigma_n} \\ \\ \frac{L + F}{H_{n-1}} & \frac{L + F}{H_{n-1}} & -\frac{1}{H_n} (L + F - V + V & \frac{\delta h}{\delta \sigma} \Big|_{\sigma_1}) \end{array}$$

c'est à dire une matrice tridiagonale (ou matrice de Jacobi). Sous les hypothèses de la page 38, les éléments de la diagonale sont strictement négatifs et coux de la première sur-diagonale et de la première sous-diagonale sont strictement positifs.

Avant d'aller plus loin, rappelons quelques propriétés d'algèbre linéaire [36, 37] ·

Une matrice est dite totalement non-négative (respectivement positive) si tous ses mineurs de tous les ordres sont non-négatifs (respectivement positifs);

 Une matrice M est dite oscillatoire si elle est totalement non négative et s'il existe un entier q > 0 tel que M^q soit totalement positive;

Les matrices oscillatoires jouissent des propriétés énoncées dans le théorème;

Une matrice de Jacobi est oscillatoire si

- les éléments de sa diagonale sont positifs,
- les éléments des premières sur-diagonale et sous-diagonale sont positifs;
- ses mineurs principaux successifs sont positifs.

Considérons maintenant la matrice \hat{A} obtenue à partir de A en changeant le signe des éléments hors-diagonaux. A et \hat{A} ont le même polynôme caractéristique car les éléments horsdiagonaux apparaissent couplés dans des produits. Les calculs montrent que $-\hat{A}$ a tous ses mineurs principaux positifs. Les valeurs propres de A étant opposées à celles de $-\hat{A}$, le premier résultat du lemme suit.

Clairement, \hat{A} et $-\hat{A}$ ont les mêmes vecteurs caractéristiques. Pour \hat{A} , la valeur propre la plus grande est associée à un vecteur propre qui admet n - 1 changements de signe dans ses coordonnées, la plus petite à un vecteur propre dont les coordonnées sont de même signe, ... $-\hat{A}$ est en effet oscillatoire. Intéressons-nous aux modifications des vecteurs propres lors du passage de \hat{A} . A Grace à la structure tridiagonale de ces matrices, il est facile d'exprimer en fonction de la première (ou de la dernière) coordonnée les autres coordonnées des vecteurs propres. On remarque alors que : les coordonnées des vecteurs propres de A et A sont égales en valeurs absolues;

le passage de à à A implique une modification de signe entre les coordonnées successives.

Soit \tilde{v} le vecteur propre de \tilde{A} correspondant à la valeur propre λ . Associons à \tilde{v} un vecteur ζ de dimension n - 1, en suivant la règle suivante ; pour i variant de l à $n \cdot 1$, s'il existe un changement de signe entre les coordonnées vé et \tilde{v}^{r+1} de λ alors $\zeta^{r} = 1$. Sions, $\zeta^{r} = 0$. Nous pouvons effectuer des opérations logiques sur de tels vecteurs. Soit maintenant v le vecteur propre de A correspondant à la même valeur propre λ . Par la seconde remarque, le vecteur ζ associé λ es obtient à partir de \tilde{c} par

$$\varsigma = \tilde{\varsigma} \star \Xi$$

où + représente le ou exclusif et $\Xi = \{1, 1, \cdots, 1\}$. Même si ceci ne permet pas de connaître a priori le signe de la première coordonnée v¹, il reste néanmoins que, si v admettait j changements de signe entre ses coordonnées successives, v en admet n - 1-j, et le résultat suit. Notamment, la valeur propre la plus élevée, qui était associée pour \hat{A} à un vecteur propre admettant n - 1changements de signe, est associée pour A à un vecteur propre dont toutes les composantes sont de même signe.

4.2 Colonnes multicomposées

La stabilité des modèles de colonnes multicomposées reste un problème ouvert. Pour une colonne à un seul plateau (un flash), nous pouvons caractériser correctement la dynamique, pour un modèle plus complet que le modèle (L,V) : elle dérive d'un potentiel sur une variété riemannienne dont la métrique est définie à partir de l'entropie. Cette dynamique est donc stable. Ce résultat, exposé dans l'annexe A, page 147, n'est pas directement extensible au cas de plusieurs plateaux superposés. Cette propriété se retrouve pour les modèles (L,V) de flashes. Soit en effet un plateau de colonne alimenté par un flux de liquide (de débit molaire L et de composition x_0) et un flux de vapeur (de débit molaire V et de composition y_0). Appelons x_1 la composition du liquide sur ce plateau et $k(x_0)$, là fonction d'équilibre liquide vapeur. Le modèles s'écrit

$$\frac{dx_1}{dt} = L(x_0 - x_1) + V(y_2 - k(x_1)).$$

Ce système est localement asymptotiquement stable puisque $\partial k/\partial x_1$ admet des valeurs propres à parties réelles positives.

Pour terminer, remarquons le lien entre la thermodynamique et les propriétés de la fonction valeur absolue du théorème de Rosenbrock, utilisé dans le cas binaire. Celle-ci est convexe et homogène de degré un, propriété dont jouissent les énergies internes associées aux systèmes thermodynamiques fermés. Ceci dit, la recherche, pour les modèles (L,V) de colonnes multicomposées, d'une fonction de Lyapunov à partir de valeurs absolues des champs de vecteurs n'est pas plus fructueuse que l'étude des systèmes linéarisés tangents. Les études numériques révèlent systèmatiquement des valeurs propres à parties réelles négatives pour les matrices des dynamiques propres. Mais nous ne sommes pas parvenus, à l'inverse du cas binaire, à déduire les propriétés de ces matrices à partie releur structure (tridiagonale par blocs). Doherty, nous le citions au chapitre précédent, remarque qu'il n'a jamais été fait mention, dans la pratique industrielle, de points stationnaires multiples pour les colonnes multicomposées. Pour compléter son propos, nous pouvos dire qu'en pratique le point stationnaire d'une colonne multicomposée est stable en boucle ouverte. Nous démontrerons au chapitre 5 la stabilité de la dynamique en boucle ouverte pour le modèle simplifié d'une classe de colonnes multicomposées, les colonnes pseudo-binaires.

Chapitre 5

Réduction

Les modèles (L,V) obtenus par la procédure décrite dans la première partie sont encore peu satisfaisants pour le calcul des lois de commande. Si en pratique ils représentent correctement le point stationnaire -et remplissent ainsi leur fonction initiale-, ils comportent des constantes de temps très diverses. Autrement dit, la matrice de dynamique propre de l'approximation tangente a un ravon spectral très important. D'un point de vue commande, il est difficile de compenser les variations rapides tout en conservant des objectifs à long terme. Par ailleurs, la représentativité des faibles constantes de temps est discutable : les constantes de temps de dynamiques négligées lors de la phase de modélisation -en particulier les régulations de base et l'hydrodynamique- sont du même ordre de grandeur. A l'inverse, nous pouvons accorder un crédit important aux constantes de temps les plus grandes. Ces constatations conduisent naturellement à l'idée qu'une loi de commande robuste doit reposer sur un modèle réduit, ne concernant que les dynamiques les plus lentes de la colonne. Nous verrons dans la seconde partie que, parmi les lois de commande qui ont été proposées, les plus robustes se conforment d'une manière ou d'une autre à cette idée. Bien entendu, le classique compromis précision-robustesse implique une précision moindre pour les commandes synthétisées sur des modèles réduits ; dans notre cas, le reiet des perturbations ne sera qu'asymptotique. Nous proposons ici des solutions pour extraire de tels modèles réduits à partir de modèles (L,V) :

 une technique "d'agrégation des plateaux" : moyennant un changement de coordonnées, les modèles (L,V) s'écrivent sous une forme singulièrement perturbée. Certains d'entre eux vérifient les conditions du théorème de Tikhonov (annexe D.1). Une réduction est alors possible, qui consiste à négliger la partie rapide stable. Deux caractéristiques sont essentielles pour appliquer cette méthode : 'unicité du point stationnaire d'un "compartjiment" formé de plusieurs plateaux superposés -pour exprimer la partie rapide en fonction de la partie lente- et la stabilité de la dynamique d'un tel compartiment -pour pouvoir négliger la dynamique rapide-;

une technique de discrimination des composés suivant leur comportement lors des équilibres liquide-vapeur rencontrés sur les plateaux. Elle est valable pour une classe de colonnes multicomposées, les colonnes pseudo-binaires. Par un argument de type perturbations (singulières et régulières), il est possible d'obtenir pour ces colonnes un modèle réduit. Le chapitre est organisé en deux sections. La réduction des modèles de colonnes binaires par la technique d'agrégation des plateaux est présenté dans la première section. Cette technique ne s'applique pas, hormis formellement, aux colonnes multicomposées. D'où l'intérêt de la seconde section, où nous étudions le cas des colonnes pseudo-binaires. Nous obtenons pour cette classe de colonnes des modèles réduits par la technique de discrimination des composés. Ces modèles jouissent de propriétés telles qu'il est possible de leur appliquer la technique d'agrégation des plateaux.

5.1 La technique d'agrégation des plateaux

Nous nous intéressons dans cette section uniquement aux colonnes binaires. L'idée de regrouper les plateaux d'une colonne en compartiments n'est pas nouvelle. Benallou et al [4], Espaa et Landau [29], notamment, ont développé des méthodes de réduction. Nous ne les commenterons pas [98]. Le principe d'agrégation par plateaux exploite les conséquences de relations existant entre les retenues molaires **H**, pour le modèle 2.1, page 39

(R1) (∃α ∈ R, α ≃ 1 | H₁ = αH_n) : les retenues molaires dans le ballon de tête et dans le ballon de fond sont du même ordre;

(R2) $(H_j \ll H_1 \forall j \notin \{1, n\})$ et $(H_j \ll H_n \forall j \notin \{1, n\})$: les retenues molaires sur les plateaux sont netterment (dix fois typiquement) plus faibles que les retenues dans le ballon de tête et dans le ballon de fond;

(R3) $(\exists k < n \mid \forall p \in \{1, n\}, \sum_{j=1}^{k} H_j \simeq H_p)$: l'accumulation des retenues molaires de plusieurs plateaux peut représenter une quantité égale à la retenue dans le ballon de tête ou la retenue dans le ballon de fond;

(R4) $(\exists l < n \mid \forall p \in \{1, n\}, \forall j \in \{1, 2, ..., n - 1, n\}, H_j \ll H_p + \sum_{i=1}^{l} H_i$), l'accumulation des retenues molaires de plusieurs plateaux et de la retenue d'un des ballons peut représenter une quantité netterment supérieure à touter retenue prise séparément.

Ces relations permettent la mise en évidence d'un petit paramètre dans les équations du modèle 2.1, page 39. Moyennant un changement des coordonnées, ce modèle apparait comme siguilièrement perturbé et le théorème de Tikhonov ou celui de la variété centre, tous deux rappelés dans l'annexe D.1, page 165, peuvent s'appliquer. Le modèle réduit utilisé pour la commande correspond alors au sous-modèle lent obtenu en régligaent les dynamiques rapides. Lévine et Rouchon [72, 98] utilisent ainsi des modèles dont la dimension différentielle est trois ou cinq, à comparer à la dimension du système de départ, au moins supérieure à quarante dans la plupart des cas. Nous détaillons ici la construction d'un modèle de dimension cinq.

Supposons égales les retenues sur tous les plateaux à l'intérieur de la colonne. Supposons aussi que $H_1 = H_n \stackrel{\Delta}{=} H$. Ces hypothèses ne sont pas nécessaires pour appliquer la méthode mais éclairissent singulièrement les calculs. La relation (R2) nous fournit le petit paramètre ε permettant de mettre en évidence deux échelles de temps dans le système : pour un plateau quelconque j à l'intérieur de la colonne, on a $H_j = \epsilon H$. L'application du théorème de Tikhonov conduit à faire tendre ϵ vers 0. Ici, il n'est physiquement pas raisonnable de considérer que les retenues sur les plateaux internes tendent vers 0. Par contre, il est possible d'interpréter correctement la décroissance de ϵ vers 0 comme un transfert des retenues entre les plateaux. Pour cela, considérons dans la colonne cinq compartiments, comme l'indique la figure 5.1, page 64 :

- le ballon de tête (plateau 1);
- un compartiment dans la zone de rectification, du plateau 2 au plateau r;
- un compartiment autour de l'alimentation, du plateau r + 1 au plateau s 1;
- un compartiment dans la zone d'épuisement, du plateau s au plateau n 1,
- le ballon de fond (plateau n).

Accordons, pour chaque compartiment à l'intérieur de la colonne, un statut particulier à un plateau. Nous appelerons plateaux sensibles ces trois plateaux r, f et s (r pour rectification et,classiquement, f pour feed -charge- et s pour stripping -épuisement-). Le choix de la positiondu plateau sensible dans le compartiment est multiple. Disons qu'il faut un écart suffisant entreles plateaux sensibles. Par la relation (R3),

$$(\exists \alpha_r \in R, \alpha_r \simeq 1 | H = \alpha_r \sum_{j=2}^{r} H_j).$$

De la même façon,

$$(\exists \alpha_f \in R, \alpha_f \simeq 1 | H = \alpha_f \sum_{j=r+1}^{s-1} H_j)$$

et

$$(\exists \alpha_s \in R, \alpha_s \simeq 1 \mid H = \alpha_s \sum_{j=s}^{n-1} H_j).$$

En utilisant les définitions de ε et des α_j , il est possible de réécrire le profil des retenues, sans en modifier les valeurs par rapport au système de départ :

$$\begin{cases}
H_1 = H \\
H_j = \varepsilon H , \forall j \notin \{1, r, f, s, n\} \\
H_r = \frac{(1 - \varepsilon \alpha_r(r - 1))}{\alpha_r} H \\
H_f = \frac{(1 - \varepsilon \alpha_f(s - r - 2))}{\alpha_f} H \\
H_s = \frac{(1 - \varepsilon \alpha_s(n - s - 1))}{\alpha_s} H \\
H_n = H
\end{cases}$$
(5.1)

Faire tendre ε vers 0 revient en définitive à transférer les retenues de l'ensemble des plateaux d'un compartiment vers le plateau sensible associé à ce compartiment. La relation (R4) est utile pour les agrégations en trois compartiments : elle ne servira pas ici.

Effectuons le changement de coordonnées :

$$\begin{pmatrix} x_{1} \\ \cdot \\ x_{j} \\ \vdots \\ x_{r} \\ \vdots \\ x_{r} \\ \vdots \\ x_{f} \\ \vdots \\ x_{f} \\ \vdots \\ x_{f} \\ \vdots \\ x_{j} \\ \vdots \\ x_{f} \\ \vdots \\ x_{j} \\ \vdots \\ x_{k+1} \\ \vdots \\ x_{n} \end{pmatrix} \mapsto \begin{pmatrix} \tilde{x}_{1} \\ - \\ \alpha_{r} \sum_{j=2}^{r-1} H_{j} x_{j} \\ H_{j} x_{j} \\ H_{j} \\ x_{j} \\ \vdots \\ \vdots \\ x_{k+1} \\ \vdots \\ x_{n} \end{pmatrix} (5.2)$$

et le changement de temps $t = \varepsilon \tau$ Dans les nouvelles coordonnées et en fonction du temps rapide τ , le système s'écrit

$$\begin{array}{rcl} \frac{H}{d\bar{x}_{r}} &= V(k(\bar{x}_{r}) - \bar{x}_{1}) \\ \vdots \\ H\frac{d\bar{x}_{r}}{d\tau} &= L(\bar{x}_{r-1} - \bar{x}_{r}) + V(k(\bar{x}_{r+1}) - k(\bar{x}_{r})) \quad (j=2 \ \mbox{a} \ r-2) \\ \vdots \\ H\frac{d\bar{x}_{r-1}}{d\tau} &= L(\bar{x}_{r-2} - \bar{x}_{r-1}) + V\left(k\left(\frac{\bar{x}_{r} - \alpha_{r} \varepsilon \sum_{r=1}^{r-2} \bar{x}_{r}}{1 - \alpha_{r} \varepsilon (r-1)}\right) - k(\bar{x}_{r-1})\right) \\ H\frac{d\bar{x}_{r}}{d\bar{x}_{r}} &= L\left(\bar{x}_{1} - \frac{\bar{x}_{r} - \alpha_{r} \varepsilon \sum_{r=1}^{r-2} \bar{x}_{r}}{1 - \alpha_{r} \varepsilon (r-1)}\right) + V(k(\bar{x}_{r+1}) - k(\bar{x}_{r})) \\ H\frac{d\bar{x}_{r+1}}{d\bar{x}} &= L\left(\frac{\bar{x}_{1} - \frac{\bar{x}_{r} - \alpha_{r} \varepsilon \sum_{r=1}^{r-2} \bar{x}_{r}}{1 - \alpha_{r} \varepsilon (r-1)}\right) + V(k(\bar{x}_{r+1}) - k(\bar{x}_{2})) \\ H\frac{d\bar{x}_{r+1}}{d\tau} &= L\left(\bar{x}_{1-2} - \bar{x}_{r}\right) + V(k(\bar{x}_{r+1}) - k(\bar{x}_{r})) \quad (j=r+2 \ \mbox{a} \ f-2) \\ \vdots \\ H\frac{d\bar{x}_{r-1}}{d\tau} &= L(\bar{x}_{f-2} - \bar{x}_{f-1}) + V\left(k\left(\frac{\bar{x}_{f} - \alpha_{f} \varepsilon (\sum_{r=1}^{r-1} \bar{x}_{r}^{2} + \sum_{r=1}^{r-2r+1} \bar{x}_{r}^{2})\right) - k(\bar{x}_{r+1})\right) \\ \frac{H}{d\bar{x}_{f}} \frac{d\bar{x}_{f}}{d\tau} &= Fz + L\frac{\bar{x}_{r} - \alpha_{r} \varepsilon \sum_{r=1}^{r-2} \bar{x}_{r}}{1 - \alpha_{r} \varepsilon (r-1)} + Vk\left(\frac{\bar{x}_{s} - \alpha_{s} \varepsilon \sum_{r=1}^{r-1} \bar{x}_{r}}{1 - \alpha_{r} \varepsilon (n-s-1)}\right) - (L+F)\bar{x}_{s-1} - Vk(\bar{x}_{r+1}) \\ \frac{H}{\bar{x}_{r+1}} \frac{d\bar{x}_{f}}{d\tau} &= L(z_{f-2} - \bar{x}_{s-1}) + V\left(k\left(\frac{\bar{x}_{s} - \alpha_{s} \varepsilon \sum_{r=1}^{n-1} \bar{x}_{r}}{1 - \alpha_{r} \varepsilon (n-s-1)}\right) - (L+F)\bar{x}_{s-1} - Vk(\bar{x}_{r+1}) \\ \frac{H}{\bar{x}_{d}} \frac{d\bar{x}_{r}}{d\tau} &= (L+F)(\bar{x}_{s-2} - \bar{x}_{s-1}) + V\left(k\left(\frac{\bar{x}_{s+1} - \alpha_{s} \varepsilon \sum_{r=1}^{n-1} \bar{x}_{r}}{1 - \alpha_{s} \varepsilon (n-s-1)}\right) - k(\bar{x}_{s-1})\right) \\ H\frac{d\bar{x}_{s+1}}{d\bar{x}} &= (L+F)(\bar{x}_{s-2} - \bar{x}_{s-1}) + V\left(k\left(\frac{\bar{x}_{s-1} - \alpha_{s} \varepsilon \sum_{r=1}^{n-1} \bar{x}_{r}}{1 - \alpha_{s} \varepsilon (n-s-1)}\right) - k(\bar{x}_{s-1})\right) \\ H\frac{d\bar{x}_{s+1}}{d\bar{x}} &= (L+F)(\bar{x}_{s-1} - \bar{x}_{s-1}) + V\left(k(\bar{x}(\bar{x}_{s}) - k(\bar{x}_{s-1} - \bar{x}_{s-1})\right) \\ H\frac{d\bar{x}_{s+1}}}{1 - \alpha_{s} \varepsilon (n-s-1)} + V\left(k(\bar{x}(\bar{x}_{s}) - k\left(\frac{\bar{x}_{s} - \alpha_{s} \varepsilon \sum_{r=1}^{n-1} \bar{x}_{s-1}}\right) + V(k(\bar{x}_{s+2}) - k(\bar{x}_{s+1})) \\ \vdots \\ H\frac{d\bar{x}_{s+1}}}{H\frac{d\bar{x}_{s+1}}}{dr} &= (L+F)(\bar{x}_{s-1} - \bar{x}_{s-1}) + V\left(k(\bar{x}_{s-1} - k(\bar{x}_{s-1} - \bar{x}_{s-1})\right) + V(k(\bar{x}_{s+2}) - k(\bar{x}_{s+1})) \\ \vdots \\ H\frac{d\bar{x}_{s+1}}{dr} &= (L+F)($$

Les dynamiques des états $\hat{x}_1, \hat{x}_r, \hat{x}_r, \hat{x}_s$ et \hat{x}_n sont visiblement plus lentes que les autres. Par le théorème de Tikhonov, nous savons qu'il est validé d'approximer la dynamique de la colonne par celle du système d'état $(\hat{x}_1, \hat{x}_r, \hat{x}_r, \hat{x}_r, h'$ dès lors que, ce système lent étant à l'état stationnaire, le sous-système rapide restant est stable. C'est effectivement le cas. Ainsi, le modèle que nous utilisons est le système algébro-différentiel obtenu pour c = 0 en temps lent :

$$\begin{split} H \frac{d\tilde{x}_{1}}{dt} &= V(k(\tilde{x}_{2}) - \tilde{x}_{1}) \\ &: \\ 0 &= L(\tilde{x}_{r-1} - \tilde{x}_{r}) + V(k(\tilde{x}_{r+1}) - k(\tilde{x}_{r})) \quad (j = 2 \ \dot{a} \ r - 2) \\ &: \\ 0 &= L(\tilde{x}_{r-2} - \tilde{x}_{r-1}) + V(k(\tilde{x}_{r+1}) - k(\tilde{x}_{r})) \\ \\ \frac{d\tilde{x}_{r}}{dt} &= L(\tilde{x}_{1} - \tilde{x}_{r}) + V(k(\tilde{x}_{r+1}) - k(\tilde{x}_{r})) \\ 0 &= +L(\tilde{x}_{r} - \tilde{x}_{r+1}) + V(k(\tilde{x}_{r+1}) - k(\tilde{x}_{r})) \\ 0 &= L(\tilde{x}_{1} - \tilde{x}_{r}) + V(k(\tilde{x}_{r+1}) - k(\tilde{x}_{r})) \\ 0 &= L(\tilde{x}_{r-1} - \tilde{x}_{r}) + V(k(\tilde{x}_{r+1}) - k(\tilde{x}_{r})) \\ 0 &= L(\tilde{x}_{r-2} - \tilde{x}_{r-1}) + V(k(\tilde{x}_{r+1}) - k(\tilde{x}_{r})) \\ 0 &= L(\tilde{x}_{r-2} - \tilde{x}_{r-1}) + V(k(\tilde{x}_{r+1}) - k(\tilde{x}_{r})) \\ 0 &= (L + F)(\tilde{x}_{r} - \tilde{x}_{r+1}) + V(k(\tilde{x}_{r+2}) - k(\tilde{x}_{r+1})) \\ 0 &= (L + F)(\tilde{x}_{r} - \tilde{x}_{r+1}) + V(k(\tilde{x}_{r+2}) - k(\tilde{x}_{r+1})) \\ 0 &= (L + F)(\tilde{x}_{r-2} - \tilde{x}_{s-1}) + V(k(\tilde{x}_{r+1}) - k(\tilde{x}_{r})) \\ 0 &= (L + F)(\tilde{x}_{r-2} - \tilde{x}_{s-1}) + V(k(\tilde{x}_{r+1}) - k(\tilde{x}_{r})) \\ 0 &= (L + F)(\tilde{x}_{r-2} - \tilde{x}_{s-1}) + V(k(\tilde{x}_{r+1}) - k(\tilde{x}_{r})) \\ 0 &= (L + F)(\tilde{x}_{r-2} - \tilde{x}_{s-1}) + V(k(\tilde{x}_{r+1}) - k(\tilde{x}_{r})) \\ 0 &= (L + F)(\tilde{x}_{r-1} - \tilde{x}_{n}) + V(k(\tilde{x}_{r+2}) - k(\tilde{x}_{r+1})) \\ 0 &= (L + F)(\tilde{x}_{r-1} - \tilde{x}_{n}) + V(k(\tilde{x}_{r+1}) - k(\tilde{x}_{r})) \\ 0 &= (L + F)(\tilde{x}_{r-1} - \tilde{x}_{n}) + V(k(\tilde{x}_{r+1}) - k(\tilde{x}_{r})) \\ 0 &= (L + F)(\tilde{x}_{r-1} - \tilde{x}_{n}) + V(k(\tilde{x}_{r+1}) - k(\tilde{x}_{r})) \\ 0 &= (L + F)(\tilde{x}_{r-1} - \tilde{x}_{n}) + V(\tilde{x}_{r+1}) - k(\tilde{x}_{r})) \\ 0 &= (L + F)(\tilde{x}_{r-1} - \tilde{x}_{n}) + V(\tilde{x}_{r+1}) - k(\tilde{x}_{r})) \\ 0 &= (L + F)(\tilde{x}_{r-1} - \tilde{x}_{n}) + V(\tilde{x}_{r+1}) - k(\tilde{x}_{r})) \\ 0 &= \tilde{x}_{n} \\ 0 &=$$

On peut montrer que la partie algébrique est inversible. Par ailleurs, le profil des retenues (5.1) et le changement de coordonnées (5.2) sont tels que nous ayons, pour $\varepsilon = 0$,

$$\begin{array}{cccc} \tilde{x}_1 &=& x_1 \\ \tilde{x}_r &=& x_r \\ \tilde{x}_f &=& x_f \\ \tilde{x}_s &=& x_s \\ \tilde{x}_n &=& x_n. \end{array}$$

La dynamique de la colonne se réduit finalement au système (agrégé) :

$$\frac{dx_i}{dt} = f_1(x_1, x_r, L, V)$$

$$\frac{dx_r}{dt} = f_r(x_1, x_r, x_f, L, V)$$

$$\frac{dx_f}{dt} = f_f(x_r, x_f, x_s, z, L, V, F)$$

$$\frac{dx_s}{dt} = f_s(x_f, x_s, x_n, L, V, F)$$

$$\frac{dx_n}{dt} = f_s(x_f, x_s, x_n, L, V, F)$$

$$y_1 = x_1$$

$$y_2 = x_n$$
(5.5)

5.1.1 Propriétés en boucle ouverte du modèle agrégé

Tout d'abord, remarquons que les points stationnaires des modèles complet et agrégé conncident. Les gains statiques sont donc les mêmes pour les deux modèles. La structure du modèle agrégé est aussi tridiagonale. Il admet un point stationnaire unique. La fonction de Lyapunov du modèle complet est directement adaptable au modèle agrégé : celui-ci est donc asymptotiquement stable. En conclusion, le modèle agrégé conserve les propriétés du modèle original [98].

5.2 Réduction des modèles (L,V) de colonnes pseudobinaires

Les deux chapitres précédents ont présenté le peu de résultats disponibles pour les colonnes multicomposées. Il est toujours possible de poser comme hypothèses l'unicité du point stationnaire et la stabilité d'un compartiment. Ces développements formels ont été présentés par P. Rouchon [98]. Dans cette section, nous nous intéressons à une classe de colonnes muticomposées, les colonnes peudo-binaires, très fréquentes en pratique. Dans un premier temps, nous développons, par une technique de discrimination des composés, des modèles approchés pour ces colonnes. Ils vérifient des propriétés qui permettent l'utilisation de la méthode d'agrégation des plateaux.

5.2.1 Introduction par un exemple

Pour une colonne réelle, le mélange d'alimentation contient la plupart du temps des composés non-clés, dans des proportions qui influent sur la séparation de manière significative. Il importe alors d'élaborer des lois de commande qui prennent en compte ce caractère multicomposé. Très souvent, le comportement de ces composés non-clés est simple, comme l'illustre l'exemple suivant. L'alimentation d'un dépropaniseur réel comprend généralement, outre ses composés clés propan est butane, au moins deux autres composés, l'éthane et le pentane. L'éthane, à deux atomes de carbone, est plus léger que le propane qui en compte trois. Nous l'appellerons composé très léger dans cet exemple. Inversement, le pentane, à cinq atomes de carbone, est plus lourd que le butane qui en compte quatre. Nous l'appellerons composé très lourd. Considérons maintenant un dépropaniseur de n = 42 plateaux, l'alimentation se faisant au plateau f = 21. Introduisons les notations suivantes :

L, V et F désignent respectivement les débits de reflux, de vapeur en fond et d'alimentation;

 x_j^l (respectivement y_j^l) désigne la fraction molaire du composé très léger dans le liquide (respectivement dans la vapeur);

 x_j (respectivement y_j) désigne la fraction molaire d'un des composés clés dans le liquide (respectivement dans la vapeur);

 - x^h_j (respectivement y^h_j) désigne la fraction molaire du composé très lourd dans le liquide (respectivement dans la vapeur);

Lorsque l'on observe les profils de composition au point stationnaire, on remarque que .

- $-x'_1$ est presque nulle dans la zone d'épuisement et très faible dans la zone de rectification. y'_2 est aussi presque nulle dans la zone d'épuisement et quasiment constante dans la zone de rectification, exception faite de quelques plateaux proches de la tête;
- inversement, x^{*}_p est presque nulle dans la zone de rectification et quasiment constante dans la zone d'épuisement, exception faite de quelques plateaux proches du fond, y^{*}_p est presque nulle dans la zone de rectification et très faible dans la zone d'épuisement.

Le produit très léger est présent essentiellement dans la zone de rectification et le produit très lourd est présent essentiellement dans la zone d'épuisement. Ce phénomène s'explique simplement à l'aide de perturbations régulières des profils statiques. En effet, pour le produit très léger, la fraction molaire dans la vapeur est beaucoup plus importante que la fraction molaire dans le liquide. Inversement, pour le produit très lourd, la fraction molaire dans le liquide est beaucoup plus importante que la fraction molaire dans la vapeur. En introduisant le réel $c, 0 < c \ll 1$, nous pouvons écrire :

$$x^{l} = \varepsilon y^{l}$$

 $y^{h} = \varepsilon x^{l}$

Le modèle (L,V) d'un plateau j de la colonne s'écrit, au point stationnaire,

$$\begin{cases} 0 = L(x_{j-1}^{i} - x_{j}^{i}) + V(y_{j+1}^{i} - y_{j}^{i}) = \varepsilon L(y_{j-1}^{i} - y_{j}^{i}) + Vy_{j+1}^{i} - Vy_{j}^{i} \\ 0 = L(x_{j-1} - x_{j}) + V(y_{j+1} - y_{j}) \\ 0 = L(x_{j-1}^{h} - x_{j}^{h}) + V(y_{j+1}^{h} - y_{j}^{h}) = L(x_{j-1}^{h} - x_{j}^{h}) + \varepsilon V(x_{j+1}^{h} - x_{j}^{h}) \end{cases}$$

Pour $\varepsilon = 0$, nous obtenons les profils

$$\begin{pmatrix} y_1^l &= 0 \\ y_2^l &= \frac{F}{V - L} z^l \\ y_j &= \frac{F}{V} z^l \quad (j = 3, \cdots, f) \\ y_j &= 0 \quad (j = f + 1, \cdots, n) \end{pmatrix} et \begin{pmatrix} x_j^h &= 0 \quad (j = 1, \cdots, f - 1) \\ x_j^h &= \frac{F}{L + F} z^h \quad (j = f, \cdots, n - 1) \\ x_n^h &= \frac{F}{L + F - V} z^h \end{pmatrix}$$

De plus, quel que soit j différent de 1, $x_j^l = 0$, x_1^l valant $Fz^l/(V - L)$; quel que soit j, $y_j^h = 0$. Ces profils sont une bonne approximation des profils réels, comme le montre la figure 5.2.1.

Nous allons exploiter dans la suite de ce chapitre les conséquences de ce phénomène sur la dynamique de la séparation.



Figure 5.1: Colonne agrégée en cinq compartiments



5.2.2 Colonnes pseudo-binaires

Définition

Commençons par définir la classe des colonnes que nous examinons dans la suite de ce chapitre.

Nous appelons colonne pseudo-binaire une colonne traitant des mélanges dont les constituants non-clés appartiennent, quel que soit le plateau, à un des deuz groupes suivants :

le groupe des composés très légers, beaucoup plus volatils que la clé légère ;

le groupe des composés très lourds, beaucoup moins volatils que la clé lourde.

Cette définition exclut notamment les colonnes dans lesquelles certains composés ont des caractéristiques proches des composés clés. L'idée principale, comme le suggère l'exemple, est d'étudier la dynamique des colonnes pseudo-binaires lorsque le réel e tend vers 0. Avant de considérer cette limite, il convient d'être attentif aux modifications à apporter aux fonctions d'équilibre : que devient l'hypothèse de compatibilité des phases (l'absence d'un composé dans une phase implique son absence dans l'autre) lorsque

- la fraction molaire des composés très légers dans le liquide tend vers 0?
- la fraction molaire des composés très lourds dans la vapeur tend vers 0?

Nous abordons ces aspects dans la section suivante. Nous pourrons alors établir le modèle approché, d'abord dans le cas simple d'une colonne à trois plateaux et quatre composés, puis dans le cas général.

Propriétés limites des fonctions d'équilibre

La modification rigoureuse des fonctions d'équilibre thermodynamique n'est pas une tâche très simple quand on désire prendre en compte l'absence de certains composés dans l'une ou l'autre des phases. Considérons tout d'abord l'équilibre de deux composés du les caractéristiques thermodynamiques sont très différentes. Si χ , la fraction molaire dans le liquide du composé le plus volatil est choisie comme coordonnée du simplexe [0, 1], la fonction d'équilibre liquide vapeur a l'allure suivante



Pour χ proche de 0, $\chi = \epsilon \Upsilon$. La pente à l'origine est proportionnelle à ϵ^{-1} Inversement, si le composé le moins volatil est choisi, nous avons



Quand χ est suffisamment éloigné de 1, $\Upsilon = \varepsilon \chi$. Faire tendre ε vers 0 revient à approximer ces deux courbes respectivement par

- $\Upsilon = 0$ si $\chi = 0$, $\Upsilon = 1$ si $\chi \neq 0$;

$$-\Upsilon = 0 \text{ si } \chi \neq 1, \Upsilon = 1 \text{ si } \chi = 1$$

Que deviennent ces approximations pour un mélange à quatre composés tels que, à pression fixée, deux composés sont proches thermodynamiquement (les composés clés), un autre est très volatil (très léger) et le dernier très peu volatil (très lourd)?
Choisissons comme coordonnées du simplexe d'équilibre les fractions molaires x' du composé très iéger, x du composé clé et x^{k} du composé très lourd. Soit $k(x', x, x^{k})$ la fonction d'équilibre. D'anèrs nos hypothèses, autour de x' = 0 et $y^{h} = 0$, son jacobien a la forme :

$$\frac{\partial k}{\partial x^l, x, x^h} = \begin{pmatrix} \frac{a_{11}}{\varepsilon} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & \varepsilon a_{33} \end{pmatrix}$$

Nous avons montré que les hypothèses nécessaires à l'établissement d'un modèle (L,V) impliquent que les valeurs propres de cette matrice sont réelles, distinctes et strictement positives (voir l'annexe B, page 159). Sa trace doit donc être strictement positive. Comme elle vaut ($a_{11} + a_{22} + \epsilon^2 a_{33})/\epsilon$, nous en déduisons $a_{11} > 0$. Par ailleurs, la somme de ses mineurs principaux (les trois matrices 2-2 extraites à partir de la diagonale) doit être stritement positive. Cette condition s'obtient facilement par le critère de Routh, par exemple. Un raisonnement similaire montre alors que $a_{22} > 0$. Comme $dy = a_{22}dx + a_{23}dx^4$ en $\epsilon = 0$, nous obtenons, pour x^4 constant, une courbe d'équilibre ayant l'allure suivante :



Les fractions molaires y^l et x^h sont définies par un bilan matière : pour un flash, par exemple, en notant :

F, L et V respectivement les débits d'entrée, de sortie liquide et de sortie vapeur;

(z^l, z, z^h) la composition de l'alimentation,

nous aurions $V y^l = F z^l \operatorname{et} L z^h = F z^h$. En définitive, l'équilibre thermodynamique a lieu uniquement entre les composés clés mais est paramétré par $y^l \operatorname{et} z^h$. Nous pouvons établir ici un parallèle entre notre approche et une hypothèse souvent utilisée dans les calculs d'équilibre en génie chimique : lorsqu'un composé très volatil (azote ou hydrogène) entre dans la composition d'un mélange à séparer par un fisah, on le suppose complétement vaporisé, de fraction molaire y^l . Si P est la pression à laquelle le flash doit opérer, les calculs sont en fait effectués à la pression partielle $P^l = P y^l$: y^l paramètre l'équilibre.

5.2.3 Etablissement du modèle dans un cas simple

Hypothèses

Hypothèses thermodynamiques

 Le liquide et la vapeur sont, sur chaque plateau, homogènes et à l'équilibre thermodynamique;

Les enthalpies molaires partielles des constituants sont indépendantes de la pression, de la température et de la composition;

- Les enthalpies molaires partielles de vaporisation de tous les constituants sont identiques
- les équilibres thermodynamiques suivent les règles établies à la section 5.2.2.

Hypothèses sur la colonne

la pression sur chaque plateau est constante;

- la retenue molaire liquide sur chaque plateau est constante;
- la retenue molaire vapeur sur chaque plateau est négligeable;
- les parois des plateaux sont adiabatiques;
- la condensation des vapeurs de tête est totale;
- le débit d'alimentation, le distillat et le résidu ne sont jamais nuls.

Notations

 Les plateaux sont numérotés du haut vers le bas, du plateau l (ballon de tête) au plateau n (ballon de fond). Les variables se rapportant au plateau j sont repérées par l'indice j

L est le débit de reflux;

- V est le débit de vapeur généré en fond de colonne;
- F est le débit d'alimentation. Sa composition est (z', z, z^h), respectivement pour les composés très léger, clé et très lourd. L'alimentation entre au plateau f;
- H_j est la retenue molaire liquide sur le plateau j;

 x_j^l (respectivement y_j^l) est la fraction molaire du composé très léger dans le liquide (respectivement dans la vapeur) sur le plateau j;

- x_j (respectivement y_j) est la fraction molaire du composé clé dans le liquide (respectivement dans la vapeur) sur le plateau j;

- x_j^h (respectivement y_j^h) est la fraction molaire du composé très lourd dans le liquide (respectivement dans la vapeur) sur le plateau j;

 k^l est la fonction d'équilibre liquide-vapeur pour le composé très léger dans les coordonnées $x^l,\,x$ et x^h ;

 k est la fonction d'équilibre liquide-vapeur pour le composé clé dans les coordonnées x^l, x et x^h;

 k^{h} est la fonction d'équilibre liquide-vapeur pour le composé très lourd dans les coordonnées x^{l} , x et x^{h} ;

 - k
 ést la fonction d'équilibre liquide-vapeur pour le composé clé dans les coordonnées y^l, x et x^k;

 \dot{k}^{h} est la fonction d'équilibre liquide-vapeur pour le composé très lourd dans les coordonnées y^{l} , x et x^{h}

Enoncé du théorème principal

Le modèle de départ est simplement le modèle (L,V) d'une colonne de trois plateaux et quatre composés où nous retenons un composé clé et les deux composés non-clés pour décrire la composition sur un plateau :

$$\begin{split} H_1 &\frac{dt_1}{dt} = V(k^i(x_2^i, x_2, x_2^k) - x_1^i) \\ H_2 &\frac{dt_2}{dt} = L(x_1^i - x_2^i) + V(k^i(x_3^i, x_3, x_3^k) - k^i(x_2^i, x_2, x_2^k)) + F(z^i - x_2^i) \\ H_3 &\frac{dt_3}{dt} = (L + F)(x_2^i - x_3^i) + V(x_3^i - k^i(x_3^i, x_3, x_3^k)) \\ H_1 &\frac{dx_1}{dt} = V(k(x_1^i, x_2, x_2^k) - x_1) \\ H_2 &\frac{dx_2}{dt} = L(x_1 - x_2) + V(k(x_3^i, x_3, x_3^k) - k(x_2^i, x_2, x_2^k)) + F(z - x_2) \\ H_3 &\frac{dx_1}{dt} = (L + F)(x_2 - x_3) + V(x_3 - k(x_3^i, x_3, x_3^k)) \\ H_1 &\frac{dx_1}{dt} = V(k^k(x_2^i, x_2, x_2^k) - x_1^k) \\ H_1 &\frac{dx_1}{dt} = U(k^k(x_2^i, x_2, x_3^k) - k^k) \\ H_1 &\frac{dx_1}{dt} = U(k^k(x_2^i, x_2, x_3^k) + V(x_3^i - k(x_3^i, x_3, x_3^k)) \\ H_1 &\frac{dx_2}{dt} = L(x_1^k - x_2^k) + V(k^k(x_3^i, x_3, x_3^k) - k^k(x_3^i, x_2, x_2^k)) + F(z^k - x_2^k) \\ H_3 &\frac{dx_3}{dt} = (L + F)(x_2^i - x_3^i) + V(x_3^k - k^k(x_3^i, x_3, x_3^k)). \end{split}$$

Le reste de cette section est dédié à la démontration du. .

Théorème 2 Sous les hypothèses de la page 69, la dynamique du système (5.6) peut être approximée par celle du système :

$$\begin{split} & H_1 \frac{dx_1}{dt} = -(V-L)x_1^l + Fz^l \\ & H_1 \frac{dx_1}{dt} = V \left(k \left(\frac{Lx_1^l + Fz^l}{V}, x_2, x_2^h \right) - x_1 \right) \\ & H_2 \frac{dx_2}{dt} = L(x_1 - x_2) + V \left(k(0, x_3, x_3^l) - k \left(\frac{Lx_1^l + Fz^l}{V}, x_2, x_2^h \right) \right) + F(z - x_2) \\ & H_3 \frac{dx_3}{dt} = (L + F)(x_2 - x_3) + V(x_3 - k(0, x_3, x_3^l)) \\ & H_1 \frac{dx_1}{dt} = -Vx_1^h \\ & H_2 \frac{dx_2}{dt} = L(x_1^h - x_2^h) + F(z^h - x_2^h) \\ & H_3 \frac{dx_3}{dt} = (L + F)x_2^h - (L + F - V)x_3^h, \end{split}$$

où k, est une fonction de y, la fraction molaire du composé léger dans la vapeur, x, et x, Elle donne la fraction molaire du composé clé dans la vapeur.

La dynamique du composé très léger est plus rapide que celle des autres composés, hormis dans le ballon de tête. Comme elle est stable, il est possible de ne considérer la dynamique du système que sur la variété attractrice définie par les équations de l'état stationnaire du composé très léger. Les trajectoires sur cette variété sont à ε près celles du système, plus simple, pour lequel les fractions molaires du composé très lourd dans la vapeur sont nulles. C'est cette description, traduite dans le théorème, que nous choisissons. Elle permet de réduire de n-1la dimension différentielle du modèle (dans cet exemple simple, n = 3 et nous ne gagnons que peu d'états!). Remarquons la présence d'une partie de la composition de l'alimentation (la fraction molaire de très léger, z^i) dans l'équation du ballon de tête. Nous retrouvons là un phénomène bien connu des opérateurs : les variations du composé très léger dans l'alimentation se répercutent presque instantanément sur le distillat. Le fait que ces perturbations ne soient pas rejetables est normal car le composé très léger ne peut physiquement pas sortir dans le produit de fond. De même, le composé très lourd ne peut pas sortir dans le produit de tête. Ses variations dans l'alimentation ne peuvent être rejetées que si nous nous désintéressons du composé clé, ce qui n'est pas le but de la commande. De fait, elles sont subies au même titre que celles du composé léger.

Notons aussi la dissymétrie des comportements des composés très léger et très lourd. Elle s'explique par l'importance, sur chaque phateau, de la retenue de liquide par rapport à la retenue de vapeur, que nous négligeons : le temps de séjour est nul dans la vapeur, mais pas dans le liquide. Les variations du composé très léger se propagent instantantement. A l'inverse, le composé très lourd est dilué sur les plateaux. Ses variations ne peuvent se propager qu'à une vitesse finie. Enfin, les constantes de temps de dilution dans la zone d'épuisement (les $H_{j}(L + F)$ ne sont pas isolèse dans les genter de l'approximation tangente. Partant, il n'est pas possible de mettre en évidence une différence d'échelles de temps entre la dynamique du composé cié et celle du composé très lourd. Ce modèle jouit de propriétés utiles qui ne seront décrites que dans le cadre général, à la section suivante.

Preuve du théorème principal

D'après les hypothèses thermodynamiques de la section 5.2.2, page 66, la fonction d'équilibre liquide vapeur pour le composé très léger, $k^{l}(x^{l}, x, x^{h})$, est telle que

$$\frac{\partial k^l}{\partial x^l} \propto \frac{1}{\varepsilon}$$

pour $x' \simeq 0$, où ε est un réel positif proche de 0. Inversement, pour le composé très lourd, $k^h(x', x, x^h)$ est telle que

$$\frac{\partial k^{h}}{\partial x^{h}} \propto \varepsilon.$$

Or, nous étudions le système pour $x^i \simeq 0$. Nous allons donc introduire ε dans ses équations pour mettre en évidence deux échelles de temps. Auparavant, il convient d'effectuer un changement de coordonnées et d'écrire en $y^i = k^i(x^i, x, x^h)$ les équations de variation du composé très léger. Alors, $x^i = \varphi^i(y^i, x, x^h)$ avec, pour $x \simeq 0$,

$$\lim_{s\to 0} \varphi^{l}(y^{l}, x, x^{h}) = 0.$$

Dans ces nouvelles coordonnées, nous notons les fonctions d'équilibre pour les composés clé et très lourd respectivement par $\hat{k}(y^{l}, x, x^{h})$ et $\hat{k}^{h}(y^{l}, x, x^{h})$. Cette dernière expression est telle que

$$\lim_{t\to 0} \tilde{k}^h(y^l, x, x^h) = 0.$$

Le système (5.6) devient

$$\begin{split} & H_1\frac{dx_1}{dt} = V\left(y_2^l - x_1^l\right) \\ & H_2\frac{dy_2^l}{\partial x_2^l} = \frac{\partial k^l}{\partial x_2^l} \cdot \left(L(x_1^l - \varphi_2^l(y_2^l, x_2, x_2^h)) + V(y_3^l - y_2^l) + F(z^l - \varphi_2^l(y_2^l, x_2, x_2^h))\right) \\ & \quad + H_3\frac{\partial k_2^l}{\partial x_2^l} \cdot \frac{dx_2}{dt} + H_3\frac{\partial k_2^l}{\partial x_2^h} \frac{dx_2^h}{dt} \\ & H_3\frac{dy_3^l}{dt} = \frac{\partial k^l}{\partial x_3^l} \cdot \left((L + F)(\varphi_3^l(y_3, x_3, x_3^l) - \varphi_2^l(y_2^l, x_2, x_2^h)) + V(\varphi_3^l(y_3^l, x_3, x_3^h) - y_3^l)\right) \\ & \quad + H_3\frac{\partial k^l}{\partial x_3^n} \frac{dx_3^l}{dt} + H_3\frac{\partial k^l}{\partial x_3^h} \frac{dx_3^h}{dt} \\ & H_1\frac{dx_1}{dt} = V(k(y_2^l, x_2, x_3^h) - x_1) \\ H_2\frac{dx_2}{dt} = L(x_1 - x_2) + V(k(y_3^l, x_3, x_3^h) - k(y_2^l, x_2, x_2^h)) + F(z - x_2) \\ & H_3\frac{dx_1}{dt} = V(k(y_2^l, x_2, x_3^h) - x_1) \\ H_1\frac{dx_1}{dt} = V(k(y_2^l, x_2, x_3^h) - x_1^h) \\ H_3\frac{dx_2}{dt} = L(x_1^h - x_2^h) + \varepsilon V(k^h(y_3^l, x_3, x_3^h) - k^h(y_2^l, x_2, x_2^h)) + F(z^h - x_2^h) \\ H_3\frac{dx_3}{dt} = (L + F)(x_2 - x_3) + V(x_3^h - k^h(y_3^l, x_3, x_3^h)). \end{split}$$

La présence commune de termes en ε et en ε^{-1} nous conduit au changement de temps $t = \varepsilon \tau$ où τ représente un temps rapide par rapport à t. En notant

$$\frac{\partial k_j^l}{\partial x_j^l} = \frac{\alpha_j}{\varepsilon}$$

où α_j représente une fonction positive de x_j^l , x_j et x_j^h , nous écrivons en τ :

$$\begin{split} & H_1 \frac{dx_1'}{d\tau} &= \varepsilon V \left(y_2' - \varepsilon x_1' \right) \\ & H_2 \frac{dy_2'}{d\tau} &= \alpha_2. \left(L(x_1' - \varphi_2^*(y_1', x_2, x_2^*)) + V(y_3' - y_2') + F(z' - \varphi_2'(y_2', x_2, x_2^*)) \right) \\ & H_2 \frac{dy_2'}{d\tau_2'} \frac{dx_2}{dx_2} + H_2 \frac{dy_1'}{dx_2'} \frac{dx_2'}{d\tau} \\ & H_3 \frac{dy_3'}{d\tau} &= \alpha_3. \left(L(L + F)(\varphi_3'(y_3', x_3, x_3^*) - \varphi_2'(y_2', x_2, x_2^*)) + V(\varphi_3'(y_3', x_3, x_3^* - y_3')) \right) \\ & H_2 \frac{dx_1'}{\partial x_3} \frac{dx_3}{d\tau} + H_2 \frac{dy_1'}{dx_2'} \frac{dx_3^*}{d\tau} \\ & H_3 \frac{dx_1'}{d\tau} &= \varepsilon V(k(y_2', x_2, x_2^*) - x_1) \\ H_2 \frac{dx_2'}{dx_3} = \varepsilon \left[L(x_1 - x_2) + V(k(y_3', x_3, x_3^*) - k(y_2', x_2, x_2^*)) + F(z - x_2) \right] \\ & H_3 \frac{dx_3}{d\tau} &= \varepsilon \left[(L + F)(x_2 - x_3) + V(x_3 - k(y_3', x_3, x_3^*)) \right] \\ & H_1 \frac{dx_1}{d\tau} &= \varepsilon V(k(y_2', x_2, x_2^*) - x_1^*) \\ H_4 \frac{dx_2}{d\tau} &= \varepsilon \left[L(x_1^* - x_2^*) + V(k(y_3', x_3, x_3^*) - k(y_2', x_2, x_2^*)) + F(z^* - x_2^*) \right] \\ & H_3 \frac{dx_3}{d\tau} &= \varepsilon \left[L(x_1^* - x_2^*) + V(k(y_3', x_3, x_3^*) - k(y_2', x_2, x_2^*)) + F(z^* - x_2^*) \right] \\ & H_3 \frac{dx_3}{d\tau} &= \varepsilon \left[L(x_1^* - x_2^*) + V(k(y_3', x_3, x_3^*) - k(y_2', x_2, x_2^*) \right] \\ & H_3 \frac{dx_3}{d\tau} &= \varepsilon \left[L(x_1^* - x_2^*) + V(k(y_3', x_3, x_3^*) - k(y_2', x_2, x_2^*) \right] \\ & H_3 \frac{dx_3}{d\tau} &= \varepsilon \left[L(x_1^* - x_2^*) + V(k(y_3', x_3, x_3^*) - k(y_2', x_2, x_2^*) \right] \\ & H_3 \frac{dx_3}{d\tau} &= \varepsilon \left[L(x_1^* - x_2^*) + V(k(y_3', x_3, x_3^*) - k(y_2', x_3, x_3^*) \right] \end{aligned}$$

Les variables rapides sont y_1^i et y_2^i ; la fraction molaire dans le liquide du composé très léger dans le ballon de tête est une variable lente. Conformément au théorème de Tikhonov (D. I, page 165), nous devons vérifier que le sous-système rapide en $\varepsilon = 0$ est hyperboliquement stable. Nous pourrons alors légitimement approximer le système de départ par le sous-système lent. Or, en $\varepsilon = 0$. Is sous-système rapide s'érit :

$$\left\{ \begin{array}{ll} H_2 \frac{dy_2^l}{d\tau} &= \dot{\alpha}_2.(V(y_3^l - y_2^l) + L \ddot{x}_1^l + F z^l) \\ H_3 \frac{dy_3^l}{d\tau} &= - \bar{\alpha}_3.V y_3^l, \end{array} \right.$$

où le signe " " sur une variable ou une fonction signifie qu'elle est constante. Ce système linéaire, triangulaire inférieur, est visiblement stable. A son point stationnaire, $y_2^l = 0$ et $y_2^l = (Lx_1^l + Fz^l)/V$ D'où l'énoncé du théorème.

5.2.4 Un modèle dans le cas général

Nous nous limitons à des énoncés concernant une colonne à n plateaux qui est alimentée, en plus des composés clés, par un unique composé très léger et un unique composé très lourd. Avec des démonstrations analogues, les résultats sont directement extensibles dans des cas où les ensembles des composés très légers et très lourds contiennent plusieurs éléments. Nous considérons la charge totalement liquide dans le seul but de simplifier l'exposé.

• Description du modèle

Théorème 3 Sous les hypothèses de la page 69 et avec les mêmes notations que dans la section précédente, la dynamique d'une colonne pseudo-binaire de n plateaux peut être approximée par le système

$$\begin{array}{rcl} H_{1}\frac{dx_{1}^{i}}{dt} &=& -(V-L)x_{1}^{i}+Fz^{i} \\ H_{1}\frac{dx_{1}}{dt} &=& V\left(\dot{k}\left(\frac{Lx_{1}^{i}+Fz^{i}}{V},z_{2},0\right)-x_{1}\right) \\ & \cdot \\ H_{j}\frac{dx_{j}}{dt} &=& L(x_{j-1}-x_{j})+V\left(\dot{k}\left(\frac{F}{V}z^{i},x_{j+1},0\right)-\dot{k}\left(\frac{F}{V}z^{i},z_{1},0\right)\right) & (j=2,\cdots,f-2) \\ & \cdot \\ H_{f-1}\frac{dx_{f-1}}{dt} &=& L(x_{f-2}-x_{f-1})+V\left(\dot{k}\left(0,x_{j+1},x_{j+1}^{i}\right)-\dot{k}\left(\frac{F}{V}z^{i},z_{1},0\right)\right) \\ H_{f}\frac{dx_{j}}{dt} &=& L(x_{f-1}-x_{f})+V\left(\dot{k}\left(0,x_{j+1},x_{j+1}^{i}\right)-\dot{k}\left(\frac{F}{V}z^{i},x_{f},x_{j}^{i}\right)\right) \\ & +F(z-x_{f}) \\ \vdots \\ H_{3}\frac{dx_{j}}{dt} &=& (L+F)(x_{j-1}-x_{j})+V\left(\dot{k}\left(0,x_{j+1},x_{j+1}^{i}\right)-\dot{k}\left(0,x_{j},x_{j}^{i}\right)\right) & (j=f+1,\cdots,n-j) \\ H_{f}\frac{dx_{j}}{dt} &=& (L+F)(x_{n-1}-x_{n})+V\left(x_{n}-\dot{k}\left(0,x_{n},x_{n}^{k}\right)\right) \\ H_{f}\frac{dx_{j}^{k}}{dt} &=& (L+F)(x_{n-1}^{i}-x_{n}^{k}) & (j=f+1,\cdots,n-j) \\ H_{n}\frac{dx_{n}^{i}}{dt} &=& (L+F)(x_{n-1}^{i}-x_{n}^{k}) & (j=f+1,\cdots,n-j) \\ H_{n}\frac{dx_{n}^{i}}{dt} &=& (L+F)(x_{n-1}^{i}-(L+F-V)x_{n}^{k}. \end{array}$$

Preuve : en appliquant la technique décrite à la section précédente, nous aboutissons à cette expression pour la dynamique du composé très léger. Sur les plateaux situés au-dessus de l'alimentation, la fraction molaire du composé très lourd es stabilise à 0. Les couplages vers les plateaux supérieurs se faisant par la vapeur, cette dynamique ne peut plus être excité : nous la négligeons. Les équations de la dynamique du composé clé sont celles obtenues par notre méthode lorsqu'est prise en compte la remarque précédente concernant le composé très lourd.

Propriétés du modèle en boucle ouverte

Dans les énoncés suivants, S est le simplexe auquel appartiennent les fractions molaires.

Théorème 4 Soit le système (5.7) sous les hypothèses de la page 69. Pour $Fz^{l}/(V - L) < 1$ et $Fz^{h}/(L + F - V) < 1$, Alors,

- (i) les trajectoires de (5.7) sont prolongeables en temps jusqu'à l'infini et restent dans S;
- (ii) (5.7) admet un point stationnaire unique dans S;

(iii) les trajectoires de (5.7) convergent asymptotiquement vers le point stationnaire.

Les hypothèses supplémentaires reliant le débit de distillat (V - L) et le débit de résidu (L + F - V) au débit et à la composition de la charge ne sont pas du tout restrictives : elles sont vérifiées pour tout fonctionnement normal de la colonne. Notamment, au point stationnaire, nous avons $Fz^i = (V - L)z_i^i$ et $Fz^k = (L + F - V)z_{h_i}^k$, avec $x_1^i < 1$ et $x_h^k < 1$. Donc $Fz^i/(V - L) < 1$ et $Fz^h/(L + F - V) < 1$.

Preuve :

Preuve de (i): on montre simplement que le champ est rentrant sur le bord de S. Le résultat suit par le théorème de prolongement sur un compact (cf chapitre 2).

Preuve de (ii) : Les équations des composés très léger et très lourd sont complétement découplées. Elles définissent un point stationnaire unique $x_1^i = Fx^i/(V-L)$, $x_2^i = Fx^i/(L+F)$ pour $j = f, \dots, n-1$ et $x_n^k = Fx^k/(L+F-V)$. Par ailleurs, l'inégalité $\frac{\partial k}{\partial x} > 0$ découle des hypothèses thermodynamiques. Nous pouvons étendre la démonstration du théorème d'unicité du point stationnaire des modèles (L,V) de colonnes binaires. La construction des difféomorphismes est possible grâce à l'inégalité précédente. Il convient cependant de préter attention à leur domaine de définition. Commencons par la zone de rectification. Rappelons que

$$y_2^l = \frac{F}{V - L} z^l;$$

$$y_j^l = \frac{F}{V} z^l \text{ pour } j \in [3, f]$$

Soit x_1 tel que $0 < x_1 < 1 - y_2^l$. Nous avons

$$y_j = (1 - \frac{L}{V})x_1 + \frac{L}{V}x_{j-1}(x_1) = (1 - \frac{L}{V})x_1 + \frac{L}{V}k^{-1}(y_{j-1}(x_1))$$

 $k^{-1}(y_{j-1}(x_1)) \in [0, 1]$, puisque le composé très lourd est absent de ces plateaux. Il nous faut vérifier que pour x_1 maximum, soit égal à $1 - y_2^l$, y_j est bien inférieur ou égal à $1 - y_j^l$. Or, à ce point,

$$y_j = (1 - \frac{L}{V})(1 - y_2^l) + \frac{L}{V} = 1 - (1 - \frac{L}{V})y_2^l = 1 - y_j^l$$

Ainsi, pour $2 < j \leq f$, $y_j \in [0, 1 - \frac{F}{V}z^{\dagger}]$ est difféomorphe à $y_2 \in [0, 1 - \frac{F}{V - L}z^{\dagger}]$. Ces difféomorphismes sont de plus simplexes-compatibles (ils envoient le bord d'un domaine sur le bord de l'autre domaine)

Pour la section d'épuisement, rappelons que

$$\begin{array}{l} - & x_n^k = \frac{F}{L+F-V} z^k \, ; \\ - & x_j^k = \frac{F}{L+F} z^k \, \, \text{pour} \, \, j \in [f,n-1] \end{array}$$

Soit x_n tel que $0 < x_n < 1 - x_n^h$. Nous avons

$$x_j = (1 - \frac{V}{L+F})x_n + \frac{V}{L+F}\tilde{k}(x_{j+1}(x_n))$$

 $\hat{k}(x_{j+1}(x_n)) \in [0, 1]$, puisque le composé très léger est absent de ces plateaux. Il nous faut vérifier que pour x_n maximum, soit égal à $1 - x_n^k$, x_j est bien inférieur ou égal à $1 - x_j^k$. Or, à ce point,

$$x_{j} = (1 - \frac{V}{L+F})(1 - x_{n}^{h}) + \frac{V}{L+F} = 1 - (1 - \frac{V}{L+F})x_{n}^{h} = 1 - x_{j}^{h}$$

Ainsi, pour $f \le j \le n - 1$, $x_j \in [0, 1 - \frac{F}{L+F}z^h]$ est diffémorphe à $x_n \in [0, 1 - \frac{L+F}{L+F-V}z^h]$. Ces difféomorphismes sont de plus simplexes-compatibles.

Le bilan matière global sur la colonne s'écrit

$$z = \frac{V - L}{F}x_1 + \frac{L + F - V}{F}x_n.$$

 x_1 et x_n sont difféomorphes à x_f . Comme dans le cas binaire, z est ainsi difféomorphe à x_f . Il nous faut vérifier que pour x_f maximum, soit égal à $1 - \frac{F}{L+F}z^k$, $z \in [0, 1 - z^l - x^k]$. Or, dans ce cas

 $y_{I} = 1 - \frac{F}{V} z^{I}$ et, d'après la propriété des difféomorphismes en rectification, $x_{1} = 1 - \frac{F}{V - L} z^{I}$; $x_{a} = 1 - \frac{F}{L + F - V} z^{b}$, par la propriété des difféomorphismes en épuisement.

Alors, $z = 1 - z^{l} - z^{h}$ Ce difféomorphisme est lui-aussi simplexe compatible.

Donc, pour $z \in [0, 1 - z^l - z^k]$, il existe un unique $x_f \in [0, 1 - \frac{F}{L + F}z^k]$. Par suite, les compositions sur tous les plateaux sont définies de manière unique et le résultat suit.

Preuve de (iii) : les dynamiques des composés très léger et très lourd sont découplées. Elles sont linéaires et stables. La trajectoire du composé clé est partout définie pendant la stabilisation des composés très léger et très lourd,-point (i)-. Les équations du point stationnaire pour ces composés définissent une variété invariante globalment attractrice. L'étude de la stabilité du système se ramène donc à l'étude de la stabilité sur cette variété (il n'existe pas de phénomène de "peaking"). Comme $(\partial k/\partial x) > 0$, les hypothèses du théorème de Rosenbrock sont vérifiées sur cette variété : la somme des valeurs absolues de champs de vecteurs associés à la dynamique du composé cie, pondérée par les H_j , est une den champs de vecteurs associés à la dynamique

Nous allons maintenant exploiter ces propriétés pour construire des modèles de commande en utilisant la méthode d'agrégation des plateaux.

5.2.5 Agrégation par plateaux du modèle simplifié

Etablissement du modèle en cinq compartiments

Soit le modèle (5.7) sous les hypothèses de la page 69. Les règles (R1) à (R4) de la page 56, qui concernent les retenues sur les plateaux, restent valables. Nous allons pouvoir construire un modèle agrégé en cinq compartiments :

- ballon de tête;

compartiment de rectification : plateaux 2 à r, la dynamique étant rapportée au plateau r ;

compartiment d'alimentation : plateaux r + 1 à s - 1, la dynamique étant rapportée au plateau f;

- compartiment d'épuisement : plateaux s à n 1, la dynamique étant rapportée au plateau s;
- ballon de fond.

Comme dans le cas binaire (section 5.1, page 56), nous supposons pour simplifier que les retenues sur tous les plateaux sont identiques et que de plus $H_1 = H_n = H$. Par la relation (R3) :

$$(\exists \alpha_r \in R, \alpha_r \simeq 1 | H = \alpha_r \sum_{j=2}^r H_j).$$

De la même façon,

$$(\exists \alpha_f \in R, \alpha_f \simeq 1 | H = \alpha_f \sum_{j=r+1}^{s-1} H_j)$$

et

$$(\exists \alpha_s \in R, \alpha_s \simeq 1 | H = \alpha_s \sum_{j=s}^{n-1} H_j).$$

Nous pouvons maintenant énoncer le..

Théorème 1 Sous les hypothèses de la page 69, la dynamique décrite par le modèle 5.7, page 75 (avec $H_1 = H_n = H$ et les H_j égaux pour $j \neq 1$ et $j \neq n$), peut être approximée par celle du modèle

$$\begin{aligned} H \frac{dx_{1}}{dt} &= -(V-L)x_{1}^{1} + Fz^{i} \\ H \frac{dx_{1}}{dt} &= V(Y_{2}(x_{1}, x_{r}, x_{1}^{i}, z^{i}, L, V, F) - x_{1}) \\ H \frac{dx_{r}}{dt} &= L(X_{r-1}(x_{1}, x_{r}, x_{1}^{i}, z^{i}, L, V, F) - x_{r}) \\ &+ V\left(Y_{r+1}(x_{r}, x_{f}, x_{i}^{i}, z^{i}, L, V, F) - k\left(\frac{F}{V}z^{i}, x_{r}, 0\right)\right) \\ H \frac{dx_{f}}{dt} &= LX_{f-1}(x_{r}, x_{f}, x_{f}^{i}, z^{i}, L, V, F) - (L + F)x_{f} \\ &+ V\left(Y_{f+1}(x_{r}, x_{s}, x_{s}^{i}, z^{i}_{s}, L, V, F) - k\left(\frac{V}{F}z^{i}, x_{r}, x_{f}^{i}\right)\right) + Fz \\ H \frac{dx_{s}}{dt} &= (L + F)(X_{s-1}(x_{f}, x_{s}, x_{s}^{i}, x_{s}^{i}, L, V, F) - x_{f}) \\ &+ V(Y_{s+1}(x_{s}, x_{s}, x_{s}^{i}, x_{s}^{i}, L, V, F) - k(0, x_{s}, x_{s}^{i})) \\ H \frac{dx_{n}}{dt} &= (L + F)X_{n-1}(x_{s}, x_{n}, x_{s}^{i}, x_{s}^{i}, L, V, F) - (L + F - V)x_{n} - Vk(0, x_{n}, x_{n}^{i}) \\ H \frac{dx_{n}}{dt} &= -(L + F)x_{s}^{i} + Fz^{i} \\ H \frac{dx_{n}}{dt} &= (L + F)(x_{1}^{i} - x_{s}^{i}) \\ H \frac{dx_{n}}{dt} &= (L + F)(x_{1}^{i} - x_{s}^{i}) \\ H \frac{dx_{n}}{dt} &= (L + F)(x_{1}^{i} - x_{s}^{i}) \\ H \frac{dx_{n}}{dt} &= (L + F)(x_{1}^{i} - x_{s}^{i}) \\ H \frac{dx_{n}}{dt} &= (L + F)(x_{1}^{i} - x_{s}^{i}) \\ H \frac{dx_{n}}{dt} &= (L + F)(x_{1}^{i} - x_{n}^{i}) \\ H \frac{dx_{n}}{dt} &= (L + F)(x_{n}^{i} - (L + F - V)x_{n}^{i} \\ \end{pmatrix} \end{aligned}$$

où

 α_r , α_f et α_s sont des réels positifs proches de 1;

 - Y_{r-2} représente la fraction molaire dans la vapeur du composé clé sortant du compartiment de rectification. Cette fonction est obtenue en résolvant les équations qui décrivent le fonctionnement (statique) de la section englobant les plateauz 2 à r - 1;

 X_{r-1} représente la fraction molaire dans le liquide du composé clé sortant du compartiment de rectification (plateaux 2 à r - 1);

 Y_{r+1} représente la fraction molaire dans la vapeur du composé clé sortant du compartiment d'alimentation (plateaux r + 1 à f - 1);

 - X_{I-1} représente la fraction molaire dans le liquide du composé clé entrant sur le plateau d'alimentation (plateaux r + 1 à f − 1); - Y_{f+1} représente la fraction molaire dans la vapeur du composé clé entrant sur le plateau d'alimentation (plateaux f + 1 à s - 1);

 X_{s-1} représente la fraction molaire dans le liquide du composé clé sortant du compartiment d'alimentation (plateaux f + 1 à s - 1);

 Y_{n+1} représente la fraction molaire dans la vapeur du composé clé sortant du compartiment d'épuisement (plateaux s + 1 à n - 1);

 X_{n-1} représente la fraction molaire dans le liquide du composé clé sortant du compartiment d'épuisement (plateaux s + 1 à n - 1).

Preuve II suffit de montrer que la dynamique d'un compartiment de *m* plateaux est stable, et, qu'une fois fixés les fractions molaires elles débits entrants, un tel compartiment admet un unique point stationnaire. Ceci ne nécessite qu'une adaptation de la preuve du théorème 4, page 76, que nous ne détaillerons pas. Un changement de variable similaire à (5.2), page 58, met alors le système sous forme singulièrement perturbée. La partie rapide en z = 0 consiste en la dynamique des sections de plateaux 2 à r - 1, r + 1 à f - 1, f + 1 à s - 1 et s + 1 à n - 1. Nous venons de voir qu'elle était stable. Par la propriété d'unicité du point stationnaire édébits et des fractions molaires entrants. Ce faisant, nous aboutissons au modèle décrit dans le théorème, qui est alors démonté.

Propriétés du modèle agrégé

Théorème 2 Considérons le modèle (5.8) sous les hypothèses de la page 69. Alors,

(i) pour toute condition initiale physiquement admissible, le système (5.8) admet une trajectoire prolongeable en temps jusqu'à l'infini, qui décrit un état physiquement admissible;

Pour z, z^l, z^h, L, V et F fixé, le système (5.8) admet un unique point stationnaire x

(iii) l'unique point stationnaire \u00ex est globalement asymptotiquement stable.

Preuve La preuve de (i) est identique à celle du point (i) du théorème 4, page 76. Les modèles 5.8 et 5.7, page 75 on les mêmes points stationnaires. Comme celui de 5.7 est unique, le point (ii) est démontré. La dynamique du composé léger (x_1^l) est découplée et stable. Celle du composé lourd $(x_1^r, x_2^*$ et $x_3^k)$ est linéaire et triangulaire inférieure. Elle est aussi découplée et stable. Une fois que les composés légers et lourds sont stabilisés, la dynamique du composé clé remplit les hypothèses du théorème de Rosenbrock. Elle est donc stable, et le point (iii) est démontré.

Ainsi, il est possible de construire, pour les colonnes pseudo-binaires, des modèles réduits de la dynamique ne conservant que les phénomènes lents que l'on souhaite réguler en pratique. Nous allons voir dans les chapitres suivants que ces modèles permettent d'élaborer des lois de commandes de reiet de perturbation qui s'avèrent robustes.

в

Commande de colonnes

Chapitre 6

Commande de modèles réduits

Ce chapitre est consacré à la description de lois de commande synthétisées à partir des modèles réduits établis dans le chapitre précédent. Elle est divisée en deux sections. La première, brève, consiste en des rappels de la commande des modèles agrégés de colonnes binaires. Dans la seconde, nous présentons la commande des modèles agrégés de colonnes pseudo-binaires et établissons un théorème d'existence pour une nolè les agrégés de sperturbations.

6.1 Commande d'un modèle réduit binaire

Nous rappelons dans cette section l'essentiel des résultats obtenus par Lévine et Rouchon [72]. Reprenons le modèle agrégé (5.5), page 61. En dérivant les sorties $y_1 = x_1$ et $y_2 = x_n$, on obtient :

$$\begin{cases} \frac{dy_1}{dt} = f_1(y_1, x_r, L, V) \\ \frac{dy_2}{dt} = f_n(x_s, y_2, L, V, F) \end{cases}$$

Soit \bar{x} l'unique point stationnaire pour $L = \bar{L}$ et V = V; $\bar{y}_1 = \bar{x}_1$ et $\bar{y}_2 = \bar{x}_n$. Les champs de vecteurs f_1 et f_n sont tels qu'est inversible la matrice

$$\left(\begin{array}{c} \left. \frac{\partial f_1}{\partial L} \right|_{\tilde{y}_1, \tilde{x}_\tau, \tilde{L}, \tilde{V}} & \left. \frac{\partial f_1}{\partial V} \right|_{\tilde{y}_1, \tilde{x}_\tau, \tilde{L}, \tilde{V}} \\ \left. \left. \frac{\partial f_n}{\partial L} \right|_{\tilde{y}_1, x_\tau, \tilde{L}, \tilde{V}} & \left. \frac{\partial f_n}{\partial V} \right|_{\tilde{y}_1, \tilde{x}_\tau, \tilde{L}, \tilde{V}} \end{array} \right)$$

Notons y_1^e et y_2^e les consignes. En choisissant des trajectoires de reférence $\varphi_1(y_1, y_1^e)$ et $\varphi_2(y_2, y_2^e)$ pour les sorties, L et V sont calculés par inversion de

$$\left\{ \begin{array}{ll} f_1(y_1, x_r, L, V) - \varphi_1(y_1, y_1^c) &= 0 \\ \\ f_n(x_s, y_2, L, V, F) - \varphi_2(y_2, y_2^c) &= 0 \end{array} \right.$$

Il reste à traiter le problème de l'observation de x_r et x_s . En effet, les variables x_r et x_s ne sont pas directement mesurables : seules les compositions x_1 et x_n des produits le sont. Par contre, si nous disposons de capteurs de température sur les plateaux r et s, il est possible d'observer x_r et x_r en utilisant les relations d'équilibre liquide-vapeur

$$\begin{cases} x_{\tau} = \beta(T_{\tau}, P_{\tau}) \\ x_{s} = \beta(T_{s}, P_{s}). \end{cases}$$

La pression de tête P_2 étant connue, P_r et P_s s'obliennent aisément par une estimation de la perte de charge entre les plateaux successifs. Si on admet que les mesures de température dont nous disposons sur site sont représentatives de l'état du modèle (L,V) complet, elles permettent d'Othenir $x_r \in x_r$ à $O(\varepsilon)$ prêt. En pratique, L et V sont calculés en inversant

$$\begin{cases} f_1(y_1, \beta(T_r, P_r), L, V) - \varphi_1(y_1, y_1^c) &= 0\\ f_n(\beta(T_s, P_s), y_2, L, V, F) - \varphi_2(y_2, y_2^c) &= 0 \end{cases}$$

Lévine et Rouchon montrent que la dynamique des zéros du système (5.5) est localement exponentiellement stable. La démonstration est technique. Elle consiste en l'utilisation du critère de Routh sur la matrice de dynamique propre du système linéarisé tangent. A ucune propriété plus forte n'a pu être obtenue, comme par exemple la stabilité globale de la dynamique des zéros du système agrégé ou la stabilité, même locale, du système complet quand L et V sont calculés à partir du modèle agrégé.

6.2 Commande du modèle réduit pseudo-binaire

Dans le cas binaire, le changement de variables sur les entrées

$$\begin{pmatrix} L \\ V \end{pmatrix} \leftrightarrow \begin{pmatrix} r_r = \frac{L}{V} \\ r_s = \frac{V}{L+F} \end{pmatrix}$$

(6.1)

permet de montrer simplement l'existence locale d'une loi de commande de rejet des perturbations [98, 72] : la dynamique en tête est indépendante de $r_{\rm e}$ de la dynamique en fond est indépendante de $r_{\rm r}$. Dans le cas pseudo-binaire, la situation est plus délicate, au moins audessus de l'alimentation : la fonction d'équilibre liquide-vapeur fait intervenir à la fois $r_{\rm r}$ et $r_{\rm s}$, par l'intermédiaire des fractions molaires du composé très léger. Cette dépendance nous oblige à particularizer la fonction d'équilibre. Nous avons choisi la classe des fonctions

$$\tilde{k}(y_{j}^{l}, x_{j}^{l}, x_{j}) = (1 - y_{j}^{l})\Psi(w_{j})$$

(6.2)

avec $w_j = x_j/(1 - x_j^k)$ et $\partial \Psi / \partial x_j^k > 0$. Ces fonctions permettent de décrire des phénomènes essentiels liés à la présence des composés très léger et très lourd.

Le lecteur se convaincra sans peine que le choix du composé clé n'influe en aucune manière sur la méthode de réduction que nous avons décrite. Il est donc possible d'écrire un modèle réduit pour la clé légère et un autre, en tous points similaire, pour le clé lourde. Or, il est commode d'exprimer les points de consigne en tête comme une fraction molaire de clé lourde et en fond comme une fraction molaire de clé légère. Notons x_j la fraction molaire de clé lourde sur le plateau j et χ_j la fraction molaire de clé légère sur le plateau j. Les fonctions obtenues par la technique d'agrégation des plateaux seront surmontées du signe "" lorsqu'elles dépendront de χ . Notammen, $k(y', x_i, x')$ devient $k'(y', \chi_i, x')$, et nous avons

$$H\frac{d\chi_n}{dt} = (L+F)\hat{X}_{n-1}(\chi_s, \chi_n, x_s^h, x_n^h, L, V, F) - (L+F-V)\chi_n - V\hat{k}(0, \chi_n, x_n^h).$$

Nous pouvons maintenant énoncer le résultat suivant.

Théorème 3 Considérons le modèle (5.8), page 79, où les fonctions d'équilibre appartiennent à la classe des fonctions définies par (6.2). Dans un voisinage du point stationnaire de (5.8), il existe une unique loi de commande qui permet de rejeter les perturbations dues à la variation de la fraction molaire du composé clé dans l'alimentation.

Cette loi de commande s'obtient en inversant en L et V le système

$$\begin{cases} V(Y_2(x_1, x_r, x_1^i, z^i, L, V, F) - x_1) - \varphi_1(x_1, x_1^i) &= 0 \\ (L + F)\dot{X}_{n-1}(\chi_s, \chi_n, x_n^k, z_n^k, L, V, F) - (L + F - V)\chi_n - V\dot{k}(0, \chi_n, x_n^k) - \varphi_2(\chi_n, \chi_n^i) &= 0, \end{cases}$$

où φ_1 et φ_2 sont des trajectoires de référence fizées pour les sorties et paramétrées par les consignes x_1^c et χ_2^c .

6.2.1 Preuve

La preuve est technique. Reprenons le changement de variables (6.1). Dans ces variables, X_k et Y_k deviennent respectivement X_k et Y_k , notation adoptée aussi pour les fonctions surmontées du signe ""

Il suffit de montrer que la matrice

$$\begin{pmatrix} r_s F & \partial \mathbf{Y}_2 \\ \overline{1 - r_r r_s} & \partial r_r \\ 0 & \frac{F}{1 - r_r r_s} \begin{pmatrix} \mathbf{x}_s F & \partial \mathbf{Y}_2 \\ \overline{1 - r_r r_s} & \partial r_s \\ \chi_n - \dot{k}(0, \chi_n, x_n^k) + \partial \dot{\mathbf{X}}_{n-1} \\ \partial r_s \end{pmatrix} \end{pmatrix}$$
(6.3)

est de rang plein. Montrons que ese éléments diagonaux ne sont jamais nuls. La preuve repose sur les propriétés des dérivées partielles des fonctions \mathbf{Y}_2 et $\mathbf{\hat{X}}_{n-1}$. Elle comprend deux parties. Dans la première, nous nous intéressons à $\mathbf{\hat{X}}_{n-1}$. La seconde est dédiée à \mathbf{Y}_2 . Auparavant, mentionnons une propriété vérifiée par le point stationnaire du modèle (5.8), page 79 : si, pour une section de plateaux succesifs (1 à m, les plateaux étant numérotés du haut vers le bas). les fractions molaires des composés très léger dans la vapeur et très lourd dans le liquide sont identiques, alors les fractions molaires du composé clé sur ces plateaux successifs sont ordonnées de la manière suivante : lorsque le composé clé est la clé légére, $\chi_1 > ... > \chi_n$;

lorsque le composé clé est la clé lourde, x₁ < ... < x_n.

Ceci découle directement des propriétés du point stationnaire des colonnes binaires, lié à la monotonie des fonctions d'équilibre Reprenons la notation habituelle pour les plateaux, du ballon de tête (1) au ballon de fond (n). Il est important de noter la nécessaire uniformité des fractions molaires des composés non-clés pour l'ordonnancement des fractions molaires du composé cêt :

- lorsque le composé clé est la clé légère, il est généralement faux d'affirmer χ₁ > χ₂. En effet, le composé très léger se concentre en tête de colonne et abaisse le point de bulle du mélange de telle sorte que k(y⁴, χ, 0) < χ. C'est le phénomène bien connu du "recyclage des légers"
- lorsque le composé clé est la clé lourde, il existe en fond de colonne un phénomène identique de "recyclage des lourds": le composé très lourd se concentre en fond de colonne et il est impossible d'assurer que z_{n-1} < z_n quand le composé clé est le composé burd.

Par contre, on peut garantir que $x_1 < x_2$ pour la clé lourde (respectivement $\chi_{n-1} > \chi_n$ pour la clé légère) : le phénomène de recycle renforce le caractère de la clé lourde (respectivement de la clé légère).

Epuisement

Considérons le compartiment formé des plateaux s + 1 à n - 1 et supposons les équations de bilan écrites pour la clé légère. Pour chaque plateau j, nous avons $x_j^h = x_n^h$, que nous noterons simplement x^h par la suite. Pour un plateau j, le bilan pour le composé clé s'écrit :

$$(\chi_{j-1} - \chi_j) + r_s(\hat{k}(0, \chi_{j+1}, x^h) - \hat{k}(0, \chi_j, x^h) = 0.$$

A χ_{j-1} , χ_{j+1} , x^h et r_s fixés, nous avons vu que cette équation définissait un unique $\chi_j = \hat{X}_j(\chi_{j-1}, \chi_{j+1}, x^h, r_s)$. Le théorème des fonctions implicite permet d'affirmer que

$$\begin{cases} \frac{\partial \hat{\mathbf{X}}_{j}}{\partial r_{s}} &= \left(1 + r_{s} \frac{\partial \hat{k}}{\partial \chi_{j}}\right)^{-1} (\hat{k}(0, \chi_{j+1}, x^{k}) - \hat{k}(0, \chi_{j}, x^{k})) \\ \frac{\partial \hat{\mathbf{X}}_{j}}{\partial \chi_{j-1}} &= \left(1 + r_{s} \frac{\partial \hat{k}_{j}}{\partial \chi_{j}}\right)^{-1} \\ \frac{\partial \hat{\mathbf{X}}_{j}}{\partial \chi_{j+1}} &= r_{s} \left(1 + r_{s} \frac{\partial k}{\partial \chi_{j}}\right)^{-1} \frac{\partial \hat{k}}{\partial \chi_{j+1}} \end{cases}$$

Comme, au point stationnaire, $\hat{k}(0, \bar{\chi}_{j+1}, \bar{x}^h) - \hat{k}(0, \chi_j, \bar{x}^h) < 0$, nous avons :

$$\frac{\partial \hat{\mathbf{X}}_{j}}{\partial r_{s}}$$
 < 0 , $\frac{\partial \hat{\mathbf{X}}_{j}}{\partial \chi_{j-1}}$ > 0 et $\frac{\partial \hat{\mathbf{X}}_{j}}{\partial \chi_{j+1}}$ > 0

Pour le compartiment en épsisement, la technique d'agrégation des plateaux nous donne notamment $\chi_{n-1} = \tilde{X}_{n-1}(\chi_n, \chi_n, \pi^+, \pi^+, \pi^+, \pi^-)$ nous obtenous une fonction similaire pour la vapeur sortant du plateau s - 1, mais elle n'est pas utile pour démontrer l'existence d'une loi de commande-. Nous allons montrer que $\partial \tilde{X}_{n-1} \partial \sigma_r < 0$ au point stationnaire. Pour cela, considérons le plateau j + 1. Alors, $(\chi_n - \chi_n, \mu) + r_n(\tilde{k}(0, \chi_n, x_n, \pi^+) - \tilde{k}(-\chi_n, \mu_{n+1}, \pi^+)) = 0$. L'expression des dérivées partielles de $\chi_{n+1} = \tilde{X}_{p+1}(\chi_{j-1}, \chi_{j+2}, \pi^+, r_n)$ fait intervenir le réel positif

$$r_s\left(1 + r_s \frac{\partial k}{\partial \chi_j}\right) = \frac{\partial k}{\partial \chi_{j+1}}$$
, qui vaut $\frac{\partial \mathbf{X}_j}{\partial \chi_{j+1}}$. Elle est telle que

$$\begin{cases} \frac{\partial \hat{\mathbf{X}}_{j+1}}{\partial r_s} = \left(1 + r_s \frac{\partial \hat{k}}{\partial \chi_j} \frac{\partial \hat{\mathbf{X}}_j}{\partial \chi_{j+1}}\right)^{-1} \left(\hat{k}(0, \chi_{j+2}, x^k) - \hat{k}(0, \chi_{j+1}, x^k) + \frac{\partial \hat{\mathbf{X}}_j}{\partial r_s}\right) \\ \frac{\partial \hat{\mathbf{X}}_{j+1}}{\partial \chi_{j+1}} = \left(1 + r_s \frac{\partial \hat{k}}{\partial \chi_j} \frac{\partial \hat{\mathbf{X}}_j}{\partial \chi_{j+1}}\right)^{-1} \frac{\partial \hat{\mathbf{X}}_j}{\partial \chi_{j+1}} \\ \frac{\partial \hat{\mathbf{X}}_{j+1}}{\partial \chi_{j+2}} = r_s \left(1 + r_s \frac{\partial \hat{k}}{\partial \chi_j} \frac{\partial \hat{\mathbf{X}}_j}{\partial \chi_{j+1}}\right)^{-1} \frac{\partial \hat{k}}{\partial \chi_{j+2}} \end{cases}$$

De la même façon, on montre par récurrence que pour tout $k \in [s + 1, n - 2]$,

$$\chi_k = \hat{X}_k(\chi_{j-1}, \chi_{k+1}, x^h, r_s),$$

avec

$$\begin{cases} \frac{\partial \tilde{\mathbf{X}}_k}{\partial r_s} &= \left(1 + r_s \frac{\partial \tilde{k}}{\partial \chi_{k-1}} \frac{\partial \tilde{\mathbf{X}}_{k-1}}{\partial \chi_k}\right)^{-1} \left(\hat{k}(0, \chi_{k+1}, x^k) - \hat{k}(0, \chi_k, x^k) + \frac{\partial \tilde{\mathbf{X}}_{k-1}}{\partial r_s}\right) \\ \frac{\partial \tilde{\mathbf{X}}_k}{\partial \chi_{j-1}} &= \left(1 + r_s \frac{\partial \tilde{k}}{\partial \chi_{k-1}} \frac{\partial \tilde{\mathbf{X}}_{k-1}}{\partial \chi_k}\right)^{-1} \frac{\partial \tilde{\mathbf{X}}_{k-1}}{\partial \chi_{j-1}} \\ \frac{\partial \tilde{\mathbf{X}}_k}{\partial \chi_{k+1}} &= r_s \left(1 + r_s \frac{\partial \tilde{k}}{\partial \chi_{k-1}} \frac{\partial \tilde{\mathbf{X}}_{k-1}}{\partial \chi_k}\right)^{-1} \frac{\partial \tilde{k}}{\partial \chi_{j+2}} \end{cases}$$

Au point stationnaire, nous avons donc

$$\frac{\partial \mathbf{X}_k}{\partial r_s} < 0, \quad \frac{\partial \mathbf{X}_k}{\partial \chi_{j-1}} > 0 \quad \text{et} \quad \frac{\partial \mathbf{X}_k}{\partial \chi_{j+1}} > 0.$$

 χ_{n-1} dépend en plus de $x_n^h \neq x^h$, mais les relations ci-dessus restent valables. En particulier, pour j = s et k = n - 1, nous obtenons le résultat souhaité. Comme de plus $\chi_n < \hat{k}(0, \chi_n, x_n^h)$, l'élément non nul de la seconde ligne de (6.3) est strictement négatíf.

Rectification

En rectification, la situation est différente puisque la fonction d'équilibre est paramétrée directement par les variables r_r , r_s et z^i -plus x_1^i au plateau 2 : en effet, la fraction molaire de très léger dans la vapeur n'est pas une variable du modèle mais intervient sur chaque plateau j $(j \in [3, f - 1])$ sous la forme Fz^l/V ($Fz^l/V + Lx_1^l/V$ au plateau 2). Nous notons $y^l = Fz^l/V$ Pour un plateau j $(j \in [3, f - 1])$, nous avons

$$r_r(x_{j-1} - x_j) + \tilde{k}(y^l, x_{j+1}, 0) - \tilde{k}(y^l, x_j, 0) = 0.$$

Nous savons que pour x_{j-1} , x_{j+1} , r_r et y^l fixés, cette équation fournit une solution unique pour x_j . Nous pouvons donc exprimer $x_j = X_j(x_{j-1}, x_{j+1}, r_r, r_s, z^l)$. Mais, dès lors que l'on sonhaite étudier le signe des dérivées particelles de X_j , des renseignements sur les dérivées particelles de k sont nécessaires : il nous faut particulariser la fonction k. Nous avons choisi la classe des fonctions (6.2). Ces fonctions permettent de retrouver le phénomène essentiel, c'est à dire

$$\frac{\partial k}{\partial y^l} < 0.$$

La dérivée partielle de X_1 par rapport à r_r est telle que

$$\left(r_r + \frac{\partial \tilde{k}}{\partial x_j}\right)^{-1} \frac{\partial \mathbf{X}_j}{\partial r_r} = (x_{j-1} - x_j) + \left(\frac{\partial \tilde{k}}{\partial y^l}\Big|_{x_{j+1}} - \frac{\partial \tilde{k}}{\partial y^l}\Big|_{x_j}\right) \frac{\partial y^l}{\partial r_r}$$

Evaluer au point stationnaire le signe du membre de droite de cette égalité revient à évaluer le signe de

$$(x_{j-1} - x_j) + (\Psi(x_{j+1}) - \Psi(x_j))z^l$$

(6.4)

Au point stationnaire, nous avons

$$(x_{j-1} - x_j) = -\frac{1 - y^l}{r_r}(\Psi(x_{j+1}) - \Psi(x_j)),$$

avec $(\Psi(x_{j+1}) - \Psi(x_j)) > 0$. D'après (6.4), nous étudions le signe de

$$z^{l} - \frac{1 - y^{l}}{r_{r}}$$
.

Montrons que ce signe est négatif. Cela revient à montrer que $z^i < r_s$. Or $Fz^i = (V - L)x_1^i$ avec $x_1^i < 1$, d'où $Fz^i < V - L$. Comme $r_s = V/(L + F) < 1$, on montre facilement que $(V - L)/F < r_s$ et le résultat suit. Ainsi,

$$\begin{array}{rcl} \displaystyle \frac{\partial X_j}{\partial r_r} &= \left(r_r + \frac{\partial k}{\partial x_j}\right)^{-1} a_j &< 0 \quad (a_j < 0) \\ \displaystyle \frac{\partial X_j}{\partial x_{j-1}} &= \left(r_r + \frac{\partial k}{\partial x_j}\right)^{-1} r_r &> 0 \\ \displaystyle \frac{\partial X_j}{\partial x_{j+1}} &= \left(r_r + \frac{\partial k}{\partial x_j}\right)^{-1} \frac{\partial k}{\partial x_{j+1}} &> 0 \end{array}$$

Pour chaque compartiment formé du plateau j et de plateaux supérieurs, la fraction molaire du débit de vapeur sortant du compartiment est définie de manière unique. Ainsi, la fraction molaire du débit liquide sortant du plateau supérieur est définie de manière unique. Soit k l'indice de ce plateau $(k \in [3, j])$. Alors $x_k = \mathbf{X}_k(x_{k-1}, x_{j+1}, r_r, r_s, z^i)$, et on montre facilement par récurrence que, pour tout plateau $k \in \{S, j\}$.

$$\begin{cases} \frac{\partial \mathbf{X}_{k}}{\partial r_{r}} &= \left(r_{r}\frac{\partial \mathbf{X}_{k+1}}{\partial z_{k+1}} + \frac{\partial k}{\partial z_{k}}\right)^{-1}a_{k} < 0 \quad (a_{k} < 0) \\ \frac{\partial \mathbf{X}_{k}}{\partial x_{k-1}} &= \left(r_{r}\frac{\partial \mathbf{X}_{k+1}}{\partial x_{k+1}} + \frac{\partial k}{\partial z_{k}}\right)^{-1}r_{r} > 0 \\ \frac{\partial \mathbf{X}_{k}}{\partial x_{j+1}} &= \left(r_{r}\frac{\partial \mathbf{X}_{k+1}}{\partial x_{k+1}} + \frac{\partial k}{\partial z_{k}}\right)^{-1} \left(\frac{\partial k}{\partial x_{k+1}} \frac{\partial \mathbf{X}_{k+1}}{\partial x_{j+1}}\right) > 0. \end{cases}$$

Les signes des dérivées partielles de X₂ sont les mêmes que ceux des dérivées partielles de la fraction molaire liquide X₄ du plateau spérieur d'un compartiment englobant le plateau j et des plateaux situés au-dessus, jusqu'au plateau 3. Il convient de regarder plus attentivement ce qui se passe lorsque le plateau 2 est englobé dans le compartiment de rectification. Nous avons $x_2 = X_3(x_2, x_4), tr, r, r, r^2$, et

$$r_r(x_1 - x_2) + k(y^l, x_3, 0) - k(y_2^l, x_2, 0)$$

avec $y_2^l = Fz^l/V + r_r x_1^l$. De la même façon, x_2 est défini de manière unique :

$$x_2 = \mathbf{X}_2(x_1, x_{j+1}, r_r, r_s, z_l, x_1^l).$$

Nous voulons montrer que

$$\frac{\partial \mathbf{X}_2}{\partial r_r} < 0$$

au point stationnaire. Pour cela, il suffit de montrer que

$$(x_1 - x_2) + (\Psi(x_3) - \Psi(x_2))z^l + x_1^l \Psi(x_2) < 0.$$
 (6.5)

Mais nous avons, au point stationnaire,

$$r(x_1 - x_2) + (1 - y^l)(\Psi(x_3) - \Psi(x_2)) + \Psi(x_2)x_1^l r_r = 0.$$

En extrayant $(\Psi(x_3) - \Psi(x_2))$ de cette relation et en la reportant dans (6.5), nous sommes amenés à montrer que

$$z^{l} - \frac{1 - y^{l}}{r_{r}} < 0$$

ce qui est vrai (voir les développements concernant le plateau j). Fixons j = r - 1. L'unicité de x_2 implique l'unicité de $y_2 = \mathbf{Y}_2(x_1, x_r, r_r, r_s, z_i, x_1^i) = k(y_2^i, \mathbf{X}_2(x_1, x_r, r_r, r_s, z_i, x_1^i), 0)$. Au point stationnaire,

$$\frac{\partial \mathbf{Y}_2}{\partial r_r} = \frac{\partial k}{\partial x_2} \frac{\partial \mathbf{X}_2}{\partial r_r} + \frac{\partial k}{\partial y_2^l} \frac{\partial y_2^l}{\partial r_r} < 0$$

Nous venons de montrer que l'élément diagonal de la première ligne de (6.3) est strictement négatif. Par suite, la matrice (6.3) est de rang plein et le théorème est démontré.

Nous ne sommes pas arrivés à démontrer la stabilité de cette loi de commande, même localement sur le modèle réduit. Mais les simulations (voir le chapitre 8, page 107) ne nous ont pas révélé d'instabilités.

6.2.2 Synthèse en température

D'un point de vue pratique, il n'est possible de mesurer que les compositions des produits, soit $x_1 \in t \chi_n$. Il reste à estimer $x_r, \chi_s, x_1^l, z^l, x_s^b \in t x_s^h$. Il est possible pour cela d'utiliser des capteurs de température. En pratique, nous mesurons les températures suivantes :

- la température T₂ au plateau 2;
- la température T_r au plateau r;
- la température T_s au plateau s;
- la température T_n au plateau n;

Les relations d'équilibre thermodynamique et les fonctions obtenues par la technique d'agrégation des plateaux nous donnent

$$\begin{cases}
T_2 = \mathbf{T}_2(P_2, x_1, x_r, x_1^l, z^l, L, V, F) \\
T_r = \mathbf{T}_r(P_r, x_r, z^l, L, V, F) \\
T_s = \mathbf{T}_s(P_s, \chi_s, x_s^h) \\
T_n = \mathbf{T}_n(P_n, \chi_n, x_n^h)
\end{cases}$$

La pression P_2 est mesurée. Comme nous disposons avec une précision suffisante de la différence de pression entre les plateaux successifs, nous pouvons obtenir simplement P_r , P_c the deux premières températures nous permettent d'obtenir z^i en fonction $de z_1^i$ et d'autres variables connues. L'équation $Hdz_1^i/dt = -(V - L)z_1^i + Fz^i$ nous permet alors d'obtenir x_1 , pois z^i et x_2 . De manière similaire, les deux dernières températures nous permettent d'obtenir z_2^k en fonction $de z_1^k$. Nous utilisons alors l'équation $Hdz_2^k/dt = (L + F)z_2^k - (L + F - V)z_3^k$ pour obtenir χ_r , z_r^i et z_2^k .

Chapitre 7

Autres approches

La commande en qualité des colonnes à distiller est un vieux problème et de très nombreux chercheurs s'y sont consarcés [20, 28, 84]. Le but est de réduire à la fois la tâche des opérateurs et la consommation d'énergie [11, 124]. Etant donnée l'ampleure de la littérature sur le sujet, un panorama des travaux ne peut pas raisonnablement prétendre à l'exhaustivité. Ici, nous tentons plutôt de montrer pourquoi certaines techniques échouent alors que d'autres permettent des performances correctes. Nous aboutissons au constat suivant :

pour commander correctement en qualité une colonne, il est nécessaire de se baser sur un modèle réduit de sa dynamique et d'utiliser des variables caractérisant son état interne.

Notre discussion s'articule autour de quatre principaux problèmes :

- (P1) les couplages : l'action sur une des deux commandes implique une variation des deux sorties;
- (P2) la grande dimension des modèles de connaissance;
- (P3) les non-linéarités;

(P4) la position des capteurs, c'est à dire le choix des variables à utiliser dans les contre-réactions.

Nous montrons que la plupart des méthodes employées jusqu'ici se heurtent à l'un ou l'autre -voire à plusieurs- de ces problèmes.

La régulation des niveaux et de la pression se fait par des boucles proportionnelles-intégrales (P.1). Celles-in e posent pas de problèmes parce qu'elles interagissent pau : l'idée d'appliquer de telles boucles pour la régulation en qualité est venue naturellement. Mais les concepteurs se sont alors heurtés au problème (**P1**). Ils ont esayé d'y remédir en modifiant les commandes utilisées, essentiellement en pernant des combinaisons linéaires ou des ratios des cinq variables L, V, F, D et R-débit de réflux, de vapeur en fond, d'alimentation, de distillat et de résidu-. Une mesure des couplages statiques - la fameuse RGA, Relative Gain Array- fut dévelopée dans ce but. Toutes les tentatives de control⁻¹, ys' référent. Leurs résultats décevants ont amené les chercheurs à une prise en compte explicite des couplages. Celle-ci implique l'utilisation de modèles de la dynamique des colonnes. Or, et c'est le problème (P2), les modèles issus de la physique sont de très grande taille puisque, même dans le cas binaire, au moins une équation différentielle est nécessaire par plateau. Partant, deux voies existent : commander le modèle de grande dimension ou un modèle réduit.

La première voie est représentée par la commande des modèles (L, V) complets, linéarisés on no. nous verons que, si le problème (**P**2) puet têre évité en non-linéaire se situent dans la seconde voie. Nous les avons présenté dans une partie distincte et insistons i sur les approches linéaires. La première question concerne la façon d'obtenir le modèle réduit, i dentifier les paramètres d'un modèle a priori de la dynamique s'avère délicat. Sur le modèle réduit, et combreuse techniques sont applicables. Nous les regroupons en commandes non-stationnaires -essentiellement des commandes de type prédictif, avec ou sans prise en compte de contraintes et commandes stationnaires -commandes linéaires quadratiques à horizon infini, par placement de polès, avec ou sans le recours au paramétrage par modèle interne. Dans les deux cas, les priolèmes liés à la représentativité des modèles réduit (P3) sont prépondèrants. La tendance principale est de prendre en compte les non-linéarités en calculant des commandes robustes face aux perturbations de modèles – *p*-synthès, H_{ac}courto, ...

Le choix des mesures à employer dans la loi de commande, le problème ($\mathbf{P4}$), est masqué par celui du choix des entrées -très étudié dans le but d'obtenir une combinaise. In de variables minimisant les couplages et permettant une commande décentralisée robustes. Il est pourtant capital d'utiliser des informations sur l'état interne de la colonne. Les variations sont décelées avant d'atteindre les sorties et peuvent être contrecarrées -cf le théorème du rejet des perturbations. Par ailleurs,

- ces informations sont facilement accessibles par des mesures de températures;
- les capteurs de température (bon marché) sont rapides et fiables. A l'inverse, la mesure des compositions, communément assurée par des chromatographes (chers), est lente : elle introduit des retards importants et de surcrôit variables (périodes d'"auto-test").

Les commandes basées sur des modèles entrées-sorties (compositions), si elles permettent d'éviters simplement les décalages statiques, s'exposent dès la conception à des problèmes de robustesse dus aux retards. Pourtant, pour une colonne binaire, réguler des températures dans la colonne (une en rectification, une en épuisement) revient, à des perturbations près, à réguler la composition des produits. Il est donc possible de considérer des modèles entrée-sorties où les sorties sont des températures internes. Toates les méthodes que nous allons décrire sont applicables à de tels modèles. Elles devaient dans ce cas s'avérer plus robustes, leur précision étant liée à une traduction correcte des consignes, de compositions en températures internes.

La plupart des auteurs n'abordent que très succintement l'identification des modèles. C'est pourtant un problème délicat, rapporté très tôt par Luyben [77, 85]. Il explique au moins en partie la disparition dans la littérature des approches adaptatives, que nous n'aborderons pas ici. On pourra consulter à ce sujet [1, 12, 13, 14, 56, 69, 80, 103, 134, 138], où les versions adaptatives de diverses techniques (linéaire géométrique, P.I., commande prédictive) sont présentées.

Ce chapitre se compose de quatre sections. Dans la première, nous abordons l'utilisation de régulateurs P.I. et le problème des couplages. La seconde est consarcée à la commande des modèles (L,V) complets. Dans la troisième, nous abordons la commande prédictive. Enfin, nous discutons quelques approches pour la commande stationnaire de modèles linéaires réduits, en particulier la synthèse par modèle interne.

7.1 Utiliser des régulateurs proportionnels-intégraux

7.1.1 La méthode

Constatons d'aborc qu'une colonne à distiller est systématiquement équipée de plusieurs boucles de ce type pour les régulations de base (niveaux et pression). L'idée d'utiliser de telles boucles à une échelle de temps plus lente pour la régulation des taux d'impurété est donc naturelle. Sur site, les configurations monovariables du type suivant sont souvent rencontrées : le débit de reflux est fixé et la puissance de rebouillage sert à réguler une température dans la zone d'épuisement. Les concepteurs de ce type de régulation ont donc très tôt régié le problème du choix des capteurs (**P**4) et on opté pour des variables internes, quitte à loiferré des déclaques statiques sur la composition des produits : les températures aux extrémités de la colonne ne sont pas utilisées ainsi.

Les problèmes apparaissent lorsqu'on tente de réguler à la fois une température en rectification et une température en épsimemet, c'est à dire lorsqu'on tente de commander une colonne en la voyant comme une concaténation de systèmes monovariables [21, 76, 129, 94]. En effet, les couplages rendent le réglage des paramètres (gains et temps intégraux) très difficile, voire impossible. Le concepteur, se heurtant ainsi au caractère multivariable des colonnes à distiller, peut alors se poser la question de l'influence du choix des commandes sur ces couplages [130]. En effet, il est possible qu'en abordant la régulation en qualité avec des commandes autres que le débit de reflux et la puissance de rébouillage, les couplages diminuent. Dans ce cas, il faut bien entendu reconsidérer la mise au point des régulateures de base.

Des éléments de réponse à cette question sont apportés par la matrice des gains relatifs, décrite à la section suivante. Remarquons auparvant l'apporche de Luyben qui, si elle n'évite pas ce problème de couplages, insiste sur l'avantage d'utiliser des températures à l'intérieur de la colonne. Soit dosc une température T_r en rectification et une température T_s en épuisement, $y_1 et y_2$ désignent espectivement la composition du distillat et celle du résidu, L et V le débit de reflux et le débit de vapeur en fond. Après avoir remarqué l'inefficatifé des boucles L \leftrightarrow yp et V \leftrightarrow yg en présence de retards réalistes, Luyben [34] propose la mise en place des régulateurs P.I. L \leftrightarrow T_r et V \leftrightarrow T_r , les points de consigne T_r^c et T_s^c pour T_r et T_r^c étant eux-mêmes calculés par des régulateurs [86] où des variables autre que L et V non utilisées. Dans [139], Luyben étend l'utilisation des températures et propose des blocles $T_r^c \leftrightarrow$ $T_r^c \to$ $T_r^c \to$ $T_r^c \to T_r^c$ et $T_r^c \to T_r^c$ et $T_r^c \to$ $T_r^c = T_r^c \to T_r^c$ et $T_r^c \to$ $T_r^c = T_r^c \to T_r^c$ et $T_r^c \to T_r^c$ et $T_r^c \to T_r^c$ et $T_r^c \to T_r^c = T_r^c \to T_r^c$ et $T_r^c \to T_r^c$ et T_r^c soulignent l'efficacité de cette structure hiérarchisée à deux échelles de temps, qui prend en compte le problème (P4).

7.1.2 La matrice des gains relatifs

Historiquement introduite par Bristol en 1966 (voir [7]), la matrice des gain relatifs est toujours utilisée dans les raffineries pour la mise au point de régulations en qualité, depuis son application aux colonnes par Shinskey [108](voir aussi [49, 81]). Elle fournit une mesure des couplages statiques et permet de choisir la commande à affecter à chaque sortie pour minimier ces couplages. On espère ains obtenir de hons résultats en bouele fermée en mettant en œuvre conjointement plusieurs boucles de régulation monovariables. Parmi la multitude d'articles qui lui sont consacrés, nous avons reteun [64, 113, 136, 137].

Principe

Les systèmes considérés sont de la forme :

$$\begin{cases} y_1 = y_1(u_1, \dots, u_n) \\ \vdots \\ y_n = y_n(u_1, \dots, u_n) \end{cases}$$

A chaque couple (y_i, u_j) est associé le rapport λ_{ij} des deux nombres suivants :

- variation de y_i par rapport à u₁, les u_k étant constants pour , k ≠ j ,
- variation de y_i par rapport à u_j, les y_k étant constants pour k ≠ i.

La variation de y_i par rapport à u_j en boucle ouverte (u_k constants pour $k \neq j$) est donc rapportée à cette même variation lorsque le système est totalement et parfaitement commandé (y_k constants pour $k \neq i$). On construit ainsi une matrice réelle $n \times n$ ayant les propriétés suivantes :

(I) La somme des éléments de chaque ligne ou de chaque colonne vaut 1;

(II) Les éléments de la matrice sont invariants par changement d'échelle, tant sur les u, que sur les y.

Pour un système (2×2), par la propriété (I), toute l'information est contenue dans la variable λ telle que

$$\frac{1}{\lambda} = \frac{\frac{\partial y_1}{\partial u_2} \frac{\partial y_2}{\partial u_1}}{\frac{\partial y_1}{\partial u_1} \frac{\partial y_2}{\partial u_2}},$$

et la matrice des gains relatifs est

$$\begin{pmatrix} \lambda & 1-\lambda \\ 1-\lambda & \lambda \end{pmatrix}$$

Considérons un bouclage $y_i \leftrightarrow u_j$ stable lorsque toutes les autres boucles sont ouvertes. Plusieurs cas se présentent pour λ_{ij} :

- λ_{ij} < 0 signifie que la boucle y_i ↔ u_j est à non minimum de phase ou instable quand les autres boucles sont fermées : le choix du couple (y_i, u_j) n'est pas souhaitable;
- $-\lambda_{ij} \gg 1$ signifie que la fermeture des autres boucles diminue fortement la sensibilité de la boucle y, $\mapsto u_j$: l'effort sur u_j devra être important pour compenser les variations de y,. Le cas limite où $\lambda_{ij} \rightarrow \infty$ (aucune action de u_j sur y, quand les autres boucles sont fermées) est à proscrire;
- λ_{ij} ≃ 0 et positif signifie que la fermeture des autres boucles augmente la sensibilité de la boucle y_i ↔ u_j. Le cas limite où λ_{ij} = 0 (aucune action en boucle ouverte de u_j sur y_i) est à proserire;
- λ_{ij} ≃ 1 et positif signifie que la fermeture des autres boucles perturbe peu le bouclage y_i ↔ y_j. ⇐ bouclage est donc intéressant mais avant de conclure il convient d'étudier le sous-système presque découplé formé des entrées et sorties restantes.

Ces quelques règles aident à choisir les bouclages à effectuer. L'idéal dans cette optique est, d'après la propriété (1), d'obtenir une matrice dont les entrées valent soit 0, soit 1. On a alors affaire à un système totalement découplé en statique.

Limites de la RGA et dérivées

La méthode, par la façon même de construire la matrice des gains relatifs, présente de sérieuses limites : le fait de supposer un fonctionnement parfait des boucles de régulation revient à négliger totalement les aspects dynamiques. Ceux-ci sont pris en compte éventuellement et de manière heuristique pour guider le choix lorsque plusieurs combinaisons s'avèrent possibles.

En conclusion, si la RGA permet d'éviter des erreurs grossières, elle s'avère néanmoins insuffisante pour la mise au point d'une commande en qualité aux performances raisonnables. En effet, aucune combinaison des entrées n'élimine totalement les couplages, même statiques [62]. la phase de réglage sur site des paramètres de la commande est fastidieuse. En pratique, cet se traduit par un abandon progressif du "decentralized control" au profit de techniques résolument multivariables. Notons toutefois que A donne des renseignements sur le comportement a priori vi à vis des variations des diverses commandes. Par une étude des valeurs singulières du transfert statique, il est possible d'intoduire un réel – appelé "disturbance condition number" fortement lié à l'114, 54, 61. On retrouve en particulier le fait que la commande (pas forcément décontralisée) est difficile quand λ est très important [115]. Cette approche permet notamment plus purs simultanément et que les variations des commandes peuvent avoir des répercussions totalement différentes suivant la direction dans laquelle elles sont appliquées [119].

Quelques chercheurs tentent de pallier certains défauts de la RGA en prenant en compte des effets dynamiques [111, 112]. Shinskey soulignait déjà ces possibilités d'extension. L'idée de base est la suivante : la vapeur générée en fond de colonne monte beaucoup plus rapidement que le liquide ne descend. Cette conséquence du transit du liquide sur les plateaux est bien connue : on trouve sur site, en monovariable, beaucoup plus de boucles puissance de rebouillage-température en épuisement que de boucles débit de reflux-température en rectification. La prise en compte de ce phénomène passe par l'introduction d'une série de filtres du premier ordre, un par plateau, pour modéliser le retard à la descente du liquide. La matrice des gains relatifs est ensuite calculée à partir des fonctions de tranfert en boucle ouverte. Dans ces conditions, si une seule des commandes utilise le débit de vapeur, il est clair que plus la fréquence augmente plus les actions sont découplées et plus $\lambda(s)$ tend vers 1. Pour chaque configuration, une fréquence s_d est calculée pour laquelle la valeur de $\lambda(s_d)$ atteint un certain seuil. Ceci permet de classer les différentes configurations par sa croissants. Sur cette base, Skogestad entend démontrer la supériorité de certaines combinaisons des commandes. Mais il ne note pas que la déstabilisation classique a lieu par création et amplification d'oscillations lentes (appelées "pompages"). Dans ce cas, ce sont bien les couplages à basse fréquence qui priment. Comme les couplages statiques ne sont jamais nuls (confère la section précédente), par continuité les couplages à basse fréquence ne le sont pas non plus, ce qui rend inefficace cette approche. Dans le même ordre d'idées, citons, ici [52, 53], où les auteurs interprétent les couplages comme des incertitudes sur un système découplé. Ils introduisent une mesure des couplages, basée sur une étude de valeurs singulières, et en déduisent des conditions sur la stablité en boucle fermée des systèmes sous commandes. décentralisées.

D'autres auteurs étudient, en boucle ouverte et au point stationnaire, la répartition des variations du débit en variations du distillat et du résidu. Cet équilibrage du bilan matière global est fonction des variables utilisées pour la régulation des niveaux : par exemple, si le débit de distillat est fixé, les variations du débit de charge ne peuvent se répercuter que sur le débit du résidu. L'idée consiste à retenir pour la commande en qualité une combinaison telle que, en boucle ouverte, cette répartition minimise les écarts des sorties [55, 65]. Ainsi, l'action de la commande serait a priori moindre pour compenser ces écarts. D'où une minimisation des problèmes de couplage et une plus grande robustesse en boucle fermée ...Cette approche ne constitue qu'un pis-aller et ne résond pas le problème des couplages - problème (P1).

7.2 Commande sur le modèle (L,V) complet

Notre approche consiste à appliquer la technique du rejet de perturbations sur des modèles réduits exprimant la dynamique lente des colonnes à distiller. Il est possible d'appliquer la même technique sur le modèle (L,V) original. Historiquement, les premiers travaux dans ce sens sont dus à l'akamatsu et al [125]. Utilisant les résultats de Wonham [135], ils ont appliqué la méthode du rejet de perturbations sur l'approximation tangente du modèle (L,V). La généralisation en non linéaire est due à Gauthier et al [44]. Si cette dernière étend le domaine de validité de la loi de commande et règle le problème (**P3**), il reste néanmoins que ces deux approches sont peu robustes.

Dans les deux cas, les travaux concernent les colonnes binaires : nous considérons le modèle (L,V) suivant.

$$\begin{array}{rcl} H_1 \frac{dx_1}{dt} &=& V(k(x_2) - x_1) \\ &\vdots \\ H_j \frac{dx_i}{dt} &=& L(x_{i-1} - x_i) + V(k(x_{i+1}) - k(x_i)) & (j = 2 \mbox{ à } f - 1) \\ &\cdot \\ H_f \frac{dx_f}{dt} &=& L(x_{f-1} - x_f) + V(k(x_{f+1}) - k(x_f)) + F(z - x_f) \\ &\vdots \\ H_j \frac{dx_i}{dt} &=& (L + F)(x_{i-1} - x_i) + V(k(x_{i+1}) - k(x_i)) & (j = f + 1 \mbox{ à } n - 1) \\ &\vdots \\ H_n \frac{dx_n}{dt} &=& (L + F)(x_{n-1} - x_n) + V(x_n - k(x_n)) \\ y_1 &=& x_1 \\ y_2 &=& x_n \end{array}$$

$$(7.1)$$

7.2.1 Commande de l'approximation tangente

Soit \bar{x} le point stationnaire de (7.1) pour $L = \bar{L}$, $V = \bar{V}$, $F = \bar{F}$ et $z = \bar{z}$. Pour le linéarisé tangent en \bar{x} , d'état $\delta x = x - \bar{x}$, les sorties sont $\delta y_1 = x_1 - \bar{x}_1$ et $\delta y_2 = x_n - \bar{x}_n$. Les commandes sont δL et δV , les perturbations du débit de charge δF

Les techniques géométriques de Wonham, basées sur des inclusions d'espaces vectoriels, montrent qu'il est possible de rejeter les variations de la composition de la charge, pas celles de son débit. En dérivant deux fois δy_1 et une fois δy_2 , on obtient

$$\begin{array}{rcl} \frac{d^2(\delta y_1)}{dt^2} &=& \displaystyle \frac{\bar{V}}{H_1} \left(\displaystyle \frac{\bar{L}}{H_2} \displaystyle \frac{\partial k}{\partial x_1} \Big|_{x_2} + \displaystyle \frac{\bar{V}}{H_1} \right) \delta x_1 \\ && \displaystyle - \displaystyle \frac{\bar{V}}{H_1} \left(\displaystyle \frac{\bar{L}}{H_2} \displaystyle \frac{\partial k}{\partial x_2} \Big|_{x_2} + \displaystyle \frac{\bar{V}}{H_1} \displaystyle \frac{\partial k}{\partial x_2} \Big|_{x_2} + \displaystyle \frac{\bar{V}}{H_2} \left(\displaystyle \frac{\partial k}{\partial x_2} \Big|_{x_2} \right)^2 \right) \delta x_2 \\ && \displaystyle + \displaystyle \frac{\bar{V}_1}{H_1} \displaystyle \frac{\partial \delta k}{\partial x_2} \Big|_{x_2} \displaystyle \frac{\partial k}{\partial x_3} \Big|_{x_2} \\ && \displaystyle + \displaystyle \frac{\partial k}{\partial x_2} \Big|_{x_2} \displaystyle \frac{\bar{V}(\bar{x}_1 - \bar{x}_2)}{H_1 H_2} \delta L + \displaystyle \frac{\partial k}{\partial x_2} \Big|_{x_2} \displaystyle \frac{\bar{V}(\bar{k}(\bar{x}_3) - k(\bar{x}_2))}{H_1 H_2} \delta V \\ && \displaystyle + \displaystyle \frac{\bar{d}(\delta y_2)}{dt} &= \displaystyle \frac{\bar{L} + \bar{F}}{H_n} \delta x_{n-1} - \displaystyle \frac{1}{H_n} \left(\bar{L} + \bar{F} - \displaystyle \frac{\partial k}{\partial x_n} \Big|_{x_n} \right) \delta x_n \\ && \displaystyle + \displaystyle \frac{\bar{x}_{n-1} - \bar{z}_n}{H_n} (\delta L + \delta F) + \displaystyle \frac{\bar{x}_n - \bar{K}_n}{H_n} \delta V \end{array}$$

En choisissant des trajectoires de référence du second ordre pour δy_1 et du premier ordre pour δy_2 , le rejet des perturbations de la composition d'alimentation est possible, moyennant la connaissance de

- F, le débit de charge;
- y1 et y2, les compositions des produits, distillat et résidu;
 - x2, x3 et xn-1, des compositions à l'intérieur de la colonne.

En effet, la matrice

$$\begin{pmatrix} \frac{\partial k}{\partial x_2} |_{\vec{x}_2} (\bar{x}_1 - \bar{x}_2) & \frac{\partial k}{\partial x_2} |_{\vec{x}_2} (\bar{x}(\bar{x}_3) - k(\bar{x}_2)) \\ (\bar{x}_{n-1} - \bar{x}_n) & (\dot{x}_n - k(\bar{x}_n)) \end{pmatrix}$$

est de rang plein pour $F \neq 0$ (il suffit d'utiliser la propriété sur le profil de composition et les relations au point stationnaire). Notons qu'il n'a jamais été prouvé que cette loi de commande grantissait un système stable en boucle fermée. Cette approche, notamment le choix des pôles, a été affinée par la suite [70, 88, 105, 106, 107, 126]. Nous n'insisterons pas sur le caractère local d'une telle loi problème (P3).

7.2.2 Commande non linéaire du modèle

On retrouve simplement, à partir de la technique du graphe développée par Lévine et Kasinski [63], qu'il est possible de rejeter génériquement les variations de composition de la charge. Le débit de charge F doit par contre être connu. Son action sur la sortie y_2 est similaire à celle des commandes L et $V : y_2$ ne peut donc pas être rendue insensible à ses variations. Pour calculer la loi de commande -voir par exemple [60] pour une description de la technique du rejet des perturbations-, on peut dériver chaque sortie une fois pour obtenir :

$$\begin{pmatrix} \frac{dy_1}{dt} = V \frac{(k(x_2) - y_1)}{H_1} \\ \frac{dy_2}{dt} = (L + F) \frac{(x_{n-1} - y_2)}{H_n} + V \frac{(y_2 - k(y_2))}{H_n} \end{pmatrix} (7.2)$$

Moyennant la connaissance de y_1, y_2, x_2, x_{n-1} et F, l'inversion de (7.2) donne L et V. Cependant, au point stationnaire de (7.1), $k(x_2) = x_1$ et la matrice de découplage

$$\Delta = \begin{pmatrix} 0 & \frac{k(x_2) - x_1}{H_1} \\ \frac{x_{n-1} - x_n}{H_n} & \frac{x_n - k(x_n)}{H_n} \end{pmatrix}$$

dégénère. Ceci est une conséquence de la condensation totale en tête de colonne et correspond à la nécessité de dériver deux fois la sortie de tête dans l'approche linéaire. Plutôt que de dériver une seconde fois y_i . Il est préférable de choisir la nouvelle sortie $\hat{y}_i = k(x_2)$: réguler la composition des vapeurs de tête revient à réguler la composition du distillat. Par dérivation des sorties, on obtient alors

$$\begin{cases} \frac{d\hat{y}_1}{dt} &= L \frac{(x_1 - k^{-1}(\hat{y}_1))}{H_2} \frac{\partial k}{\partial x_2} + V \frac{(k(x_3) - \hat{y}_1)}{H_2} \frac{\partial k}{\partial x_2} \\ \frac{dy_2}{dt} &= (L + F) \frac{(x_{n-1} - y_2)}{H_n} + V \frac{(y_2 - k(y_2))}{H_n} \end{cases}$$

Cette loi de commande nécessite en plus la connaissance de x_3 . Par contre, la matrice de découplage

$$\tilde{\Delta} = \begin{pmatrix} \frac{(x_1 - x_2)}{H_2} \frac{\partial k}{\partial x_2} & \frac{(k(x_3) - k(x_2))}{H_2} \frac{\partial k}{\partial x_2} \\ \frac{x_{n-1} - x_n}{H_n} & \frac{x_n - k(x_n)}{H_n} \end{pmatrix}$$

n'est pas dégénérée au point stationnaire. Notons qu'il n'a jamais été prouvé que cette loi de commande garantissait un système stable en boucle fermée.

7.2.3 Commentaires

Indépendamment du problème posé par la mesure ou l'observation de compositions à l'intérieur de la colonne, ces lois de commande sont moins robustes que celles calculées à partir de modèles réduits. Les raisons sont liées à la fois au modèle utilisé – problème (P2) – et aux caractéristiques en boucle fermée. Nous avons comparé les spectres d'un modèle (L,V) binaire en boucle fermée, la commande étant calculée soit directement sur ce modèle, soit sur un modèle réduit obtenu par la technique d'agrégation des plateaux. Ces comparaisons montrent que :

 dans tous les cas, la commande calculée sur le modèle complet modifie les faibles constantes de temps du modèle; - sur le modèle réduit, au fur et à mesure qu'est restreint le nombre des plateaux pour les compartiments de rectification et d'épuisement (au profit du compartiment d'alimentation), la commande modifié des constantes de temps de plus en plus faibles.

Utiliser des mesures proches des extrémités implique des variations plus brutales de la commande car les perturbations sont observées tardiverment – problème (P4)–. Nous avons par ailleurs mentionné dans la partie précédente la mauvaise représentativité des faibles constantes de temps du modèle (L, V). Ceci se traduit en boucle fermée par une mauvaise nerécision des gains de la commande. Ces variations plus brutales et moins précises de la commande ne sont pas sensibles quand il n'y a qu'un très faible retard à l'acquisition des mesures et au passage des commandes. Dans le cas contraire, la dynamique de la colonne est beaucoup plus excitée, et l'ensemble de ces différents phénomènes tend à déstabiliser l'ensemble colonne-commande, comme le montrent les simulations du chapitre 8.

Nous discutons brièvement en annexe d'un observateur proposé par Deza [22], qui permettrait de reconstituer l'état du modèle complet et éviteurit ainsi la mesure des compositions internes. Nous montrons dans la section 8 que même sous l'hypothèse d'un état mesuré, la commande du modèle complet est très sensible aux retards sur les sorties. En conséquence, l'utilisation de cet observateur l'andiorerait pas ses performances.

7.3 Commande prédictive

C'est une méthode très employée dans l'industrie. Elle consiste à calculer la commande par minimisation d'un certain critère sur un horizon fini, ce qui revient à résoudre un problème d'optimisation. L'erreur entre les sorties -dont l'évolution est prédite par un modèle- et leurs consignes entre toujours dans le critère. Une pénalisation de la variation des commandes lui est adjointe la plupart du temps.

Le type du critère, la définition ou non de contraintes, le type de modèle linéaire utilisé conduisent à de très nombreuses variantes. Les critères linéaires sont peu utilisés (pour un exemple, voir [10], où les auteurs utilisent un algorithme de programmation linéaire). Les critères quadratiques leur sont généralement préférés. Les problèmes sans contraintes ont été utilisés les premiers, Citons le "Model Algorithmic Control" et le "Dynamic Matrix Control" [19, 87, 141]. La résolution de tels problèmes est simple d'un point de vue algorithmique. La possibilité d'indroduire des contraintes sur les sorties et les commandes semble avoir été un élément déterminant dans le succès de ces approches auprès des industriels. Introduites dans ce contexte par Garcia et Morshedi (Quadratic Dynamic Matrix Control) [41], elles sont actuellement très en vogue [43, 50, 140]. Il n'existe que peu de renseignements sur les algorithmes de résolution. Les méthodes des contraintes actives (résolution des conditions de Kuhn-Tucker) et du gradient réduit semblent généralement utilisées [93]. Un exposé de ces algorihmes est disponible dans [75]. ou [16, 17, 18]. Un résumé complet des diverses approches et applications existe dans [42], où les auteurs exhibent les similitudes avec la méthode du modèle interne, discutée dans la section 7.5. Le but n'est pas ici de détailler toutes ces approches, ni d'analyser les problèmes d'initialisation et de convergence des algorithmes, ou les problèmes de stabilité en boucle fermée. Nous ne remettons pas en cause le fait qu'elles puissent fonctionner correctement -au moins tant que le système évolue dans un voisinage du point pour lequel le modèle à cité identifié-. Mais nous remarquons cependant que l'utilisation d'un modèle réduit de la dynamique est systématique. En effet, des modèles entrées-sorties sont utilisés -les sorties sont les compositions des produits et non des températures interner-. Comme les systèmes considérés sont stables, les tranferts sont développés en séries, tronquées à un certain ordre. Même si cette réduction est dictée par des problèmes de complexité numérique, elle facilite l'identification et revient à utiliser un modèle le la dynamique lente. Ceci conforte notre constatation sur l'utilisation des modèles réduits. Là encore, le désavantage principal réside dans l'approximation linéaire et des travaux récents tentent d'y remédier (par excemple en utilisant une prédiction en partie non linéaire [43]).

7.4 Commandes stationnaires de modèles réduits

Dans cette section, nous décrivons :

 la commande par modèle interne, qui occupe une place très importante dans la littérature depuis les travaux de Morari [116];

une méthode de réduction, dite des réalisations équilibrées. Nous n'affirmons pas que cette méthode conduit à une régulation plus performante que les approches par commande prédictive ou par modèle interne. Nous souhaitons simplement montrer la robustesse de la commande des modèles réduits. Dans ce but, nous utiliserons comme exemple dans le prochain chapitre un modèle réduit par cette méthode. Nous mettrons en cœuvre sur ce modèle un schéma classique observateur-contrôleur (calculé par synthèse quadratique, $\Delta u = K\Delta x$ avec K solution d'une équation de Ricatti) qui nous servira en quelque sorte de prototype des commandes de modèles linéaires réduits.

7.5 Synthèse par modèle interne

Plusieurs chercheurs insistent beaucoup sur la pertinence de l'approche par modèle interne. Elle concerne les systèmes linéaires¹ et consiste à utiliser une paramétrisation différent des contrôleurs. La dynamique du procédé est supposé vérifier la relation entrées-sorties fréquentielle

$$y(s) = G(s)u(s) + d(s),$$

où

- y(s) est le vecteur des sorties;
- u(s) est le vecteur des entrées;
 - d(s) est un vecteur de perturbations;

¹dans [37], les auteurs proposent une extension non-linéaire pour un modèle stable, mono-entrée et monosortie, de fermenteur. Dans [27], Economou et al tentent une extension plus globale mais peu convaincante : il reste beaucoup de problemes d'inversion et de stabilité à régler.

G(s) est la fonction de transfert du procédé.

Pour atteindre la consigne y^{*}, au lieu d'utiliser le classique régulateur C(s) de la figure 7.1, cette approche se base sur la figure 7.2, où $\tilde{G}(s)$ est la connaissance disponible du procédé et $G_i(s)$ est défini par l'utilisateur [145]. Les deux représentations sont équivalentes : pour chaque couple $(\tilde{G}(s), G_i(s))$, il existe $C(s) = (I - G_i(s)\tilde{G}(s))^{-1}G_i(s)$ qui conduit au mème transfert de y^{*}(s) à y(s). On a

$$y(s) = G(s)(I - G_c(s)(G(s) - \tilde{G}(s)))^{-1}G_c(s)(y^c(s) - d(s)) + d(s).$$

Mais, si on suppose que $G(s) = \hat{G}(s)$, la synthèse est très simple puisqu'il suffit, si G(s) est stable, d'assuret la stabilité de $G_c(s)$ pour garantir la stabilité de l'ensemble. Comme l'ont remarqué Garcia. Prett et Morari, cette paramétrisation n'est pas récente (voir les références dans [42]. Son intérêt est de simplifer la mise au point des contrôleurs. Pour $\hat{G}(s)$ stable, Garcia et Morari [38, 39] proposent la démarche suivante :

- (i) factoriser G̃(s) en G̃(s) = G̃₊(s)G̃_−(s), où G̃₊(0) = I, G̃₊(s) comprend tous les retards et les zéros instables de G̃(s);
 - (ii) choisir un "filtre" F(s) tel que F(0) = I;
 - (iii) choisir $G_c = G_{-}(s)^{-1}F(s)$.

Les conditions sur $G_+(0)$ et F(0) permettent d'éviter les décalages statiques. Le rôle de F(s)est d'adoucir les variations de la commande et de garantir la possibilité de réaliser G_c [104, 131]. Garcia et Morari [40], puis d'autres, ont cherché depuis à calculer différemment les contrôleurs $G_c(s) = H(s)F(s)$. La démarche reste la même,

recherche d'un H(s) pour $\tilde{G}(s) = G(s)$;

synthèse de F(s) pour conserver une certaine robustesse pour G̃(s) ≠ G(s),

mais les étapes de recherche de H(s) et F(s) sont plus raffinées. H(s) est la solution d'un problème d'optimisation, au sens H_{s-r} plus ararement au sens de la norme H_2 [143, 144, 142]. Un lien existe avec la commande prédictive [42] : on cherche à obtenir en boucle fermée des performances définies par le critère à minimiser. Là on obtient directement la valeur des commandes (la commande est non-stationnaire) alors qu'ici on obtient la fonction de transfert d'un contrôleur (la commande est stationnaire). Le filtre F(s) est calculé par la méthode de la valeur singulière de structure, autrement dit par la μ -synthèse introduite par Doyle [25, 26]. La comnaissance de la structure des incertitudes sur le modèle est alors nécessaire [117, 119, 118]. Se greffent donc sur la structure par modèle interne les approches récentes de commande linéaire "robuste" [33, 32].

Les modèles du procédé sont des modèles réduits de la dynamique lente et vont dans le sens d'une résolution de (P2). (P4) n'est pas abordé : dans les articles, les sorties sont les compositions des produits. Il est cependant probable que pour les applications, la méthode soit utilisée sur des modèles dont les sorties sont des températures internes. L'approche suivie pour tenter de résoudre (P3) consiste en une étude de la robustesse face aux perturbations de modèles.



Figure 7.1: Approche classique



Figure 7.2: Approche par modèle interne et robustesse
7.5.1 Exemple de commande d'un modèle réduit

Nous avons vu que la réduction du modèle de commande a une grande importance. Plusieurs techniques sont envisageables pour la mener à bien. L'identification d'un modèle a priori de la dynamique est courante. Sans même parler des difficultés qui lui sont inhérentes (on pourra consulter à ce propos [85, 17]), elle nécessite de nombreux tests sur le site, qui perturbent la bonne marche de la rafinerie. Il s'agit en effet d'analyser la réponse à des échelons ou à des impulsions sur les commandes et le débit de la charge, tout en maintenant la colonne autour du même point de fonctionnement – la composition de charge devant donc être constante-. Nous procédons différemment. A partir de renseignements sur la géométrie de la colonne et son modè de fonctionnement, nous construisons un modèle de conalissance, de type (Ly.V. L'approximation tangente de ce modèle nous fournit un système linéaire que nous pouvons alors réduire. Aucune procédure d'identification sur site n'est dans ce cas nécessaire. Bien entendu, une telle aporoche ne perment pas de modéliser des retards – set-ce si impourtant?

Par contre, l'obtention de linéarisés tangents en de nouveaux points stationnaires est plus simple. Par al illeurs, le modéle complet permet le calcul de plusieurs modélies réduits d'ordres différents sans difficulté. Nous présentons ici la méthode de réduction dite des réalisations équilibrées, introduite par Moore dans [83, 89]. Nous ne prétendons pas que cette méthode offre des performances vraiment inféressante d'un point de vue pratique. Nous nous en servirons dans le troisième chapitre (107) pour montrer en simulation que les commandes à bases de modèles linéaires réduits sont plus robutste que les approches sur des modèles linéaires complets.

Soit le système linéaire stationnaire

$$\begin{cases} \frac{dx}{dt} = Ax + Bu\\ y = Cx \end{cases}$$

où $x \in \mathbb{R}^{n}$, $u \in \mathbb{R}^{m}$ et $y \in \mathbb{R}^{m}$

Les grammiens de commandabilité

$$W_c = \int_0^\infty e^{tA} B B^T e^{tA^T} dt$$

et d'observabilité

$$W_o = \int_0^\infty e^{tA^T} C^T C e^{tA} dt$$

sont les uniques matrices symétriques définies positives respectivement solutions des équations de Lyapunov

$$AW_c + W_c A^T = -BB^2$$

et

$$A^T W_o + W_o A = -C^T C.$$

Une réalisation $(\tilde{A}, \tilde{B}, \tilde{C})$ est dite équilibrée si

(i) elle est minimale;

(ii)
$$\frac{dx}{dt} = Ax$$
 est un système asymptotiquement stable;

(iii) les grammiens de commandabilité et d'observabilité correspondants sont égaux à la matrice diagonale $\Lambda = \text{diag}(\sigma_1, \dots, \sigma_n), \sigma_1 \geq \sigma_2 \geq \dots \geq \sigma_n$, où les σ_i sont les valeurs singulières de \hat{A} .

Moore montre que, sous les conditions (i) et (ii), il existe un changement de coordonnées linéaire de l'état qui rend la réalisation (A, B, C) équilibrée. Il propose alors de réduire le système en ne conservant, pour la réalisation équilibrée, que les états correspondant aux plus grandes valeurs singulières de A. Ceci revient à éliminer les états les moins commandables et observables. La stabilité du système réduit est par ailleurs garantie (c'est une conséquence de la stabilité de A).

Il existe plusieurs algorithmes pour calculer le changement de coordonnées [68, 71, 83]. Voici celui proposé par Moore, largement amélioré depuis :

- Calculer le grammien de commandabilité W_c du système original;
- Mettre W_c sous la forme $W_c = V_c \Sigma_c \Sigma_c V_c^T$;
- Effectuer le changement de coordonnées x = V_cΣ_cx̂;
- Calculer le grammien d'observabilité Ŵe du système transformé;
- Mettre \hat{W}_{o} sous la forme $\hat{W}_{o} = \hat{V}_{o}\hat{\Sigma}_{o}\hat{\Sigma}_{o}\hat{V}_{o}^{T}$;
- Effectuer le changement de coordonnées $\hat{x} = \hat{V}_o \hat{\Sigma}_o^{-\frac{1}{2}} \tilde{x}$. Le système en \hat{x} a une représentation équilibrée.

Chapitre 8

Simulations

Ce chapitre est consacré à la présentation de résultats de simulation. Il est organisé en deux sections :

dans la première, nous comparons les performances de quatre méthodes pour la commande d'une colonne binaire (un dépropaniseur) : nous montrons qu'il est nécessaire en pratique d'utiliser un modèle de la dynamique lente ;

 - dans la seconde, nous présentons, pour une colonne pseudo-binaire (une stabilisation d'essences) dans un environnement très perturbé, les performances de la loi de commande que nous avons exposée au chapitre 6, page 83.

8.1 Comparaisons de diverses méthodes

8.1.1 Description de la colonne

La colonne choisie pour ces simulations est un dépropaniseur, pour lequel les composés clés sont le propane et le butane. Cette colonne de 42 plateaux est alimentée au plateau 21 par un mélange contenant

- 2,5% d'éthane;

35% de propane;

- 60% de butane;
 - 2,5% de pentane.

Les produits de la séparation sont :

un distillat qui contient majoritairement du propane. L'éthane contenu dans l'alimentation se concentre en tête de colonne et ne peut sortir que dans ce produit. La régulation de la fraction molaire de butane dans le distillat constitue un des objectifs de la commande ; - un résidu qui contient majoritairement du butane. Le pentane contenu dans l'alimentation se concentre en fond de colonne et ne peut sortir que dans ce produit. La régulation de la fraction molaire de propane dans le résidu constitue le second objectif de la commande.

Dans les conditions simulées, la colonne doit permettre d'obtenir des taux d'impureté considérés comme faibles dans l'industrie du raffinage (les critères sont plus stricts en pétrochimie où les taux d'impureté doivent être de l'ordre d'une partie par million -ppm-):

le distillat contient 0,5% de butane;

le résidu contient 0,5% de propane.

Ces valeurs sont représentatives des souhaits des utilisateurs, les résultats sur site du chapitre suivant le montrent.

Les équations utilisées pour la simulation sont celles présentées dans la première partie du mémoire sur chaque plateau, nous écrivons un bilan de matière et d'énergie pour les quatre composés et utilisons un modèle hydrodynamique. Les caractéristiques et les relevés de fonctionnement de la colonne réelle nous permettent de choisir divers paramètres de manière à reproduire au mieux sa dynamique. Le sytème algébro-différentiel ainsi défini est integré grâce au logicie SPEDUP.

8.1.2 Description des lois de commande testées

Etant données les faibles teneur en éthane et pentane de l'alimentation, la colonne est supposée binaire. Nous avons écrit le modèle (L,V) correspondant à la dynamique des composés clés, propane et butane. Le composé de référence est le propane. La retenue molaire par plateau est estimée à partir du point stationnaire du modèle de simulation décrit précédemment.

Commande linéaire du modèle (L,V) complet

C'est la commande de l'approximation tangente du modèle (L, V). Cette commande nécessite la connaissance de l'état correspondant aux plateaux 2,3 et n - 1, c'est à dire l'écart à la fraction molaire de propane à l'équilibre. Par un calcul du point stationnaire du modèle (L,V), nous connaissons les fractions molaires de propane à l'équilibre. Quoiqu'elles ne soient pas mesurables en pratique, le contrôleur dispose en simulation des fractions molaires de propane sur ces plateaux : elles sont supposés parfaitement mesurées, nous ne construisons pas d'observateur.

La trajectoire de référence pour la sortie de tête est du second ordre. Pour la sortie de fond un premier ordre suffit. Les pôles choisis pour ces trajectoires correspondent à des constantes de temps de dix minutes. Nous avons testé des valeurs différentes, mais les résultats obtenus sont comparables avec ceux décrits ci-dessous.

Commande non-linéaire du modèle (L,V) complet

Nous appliquons la technique du rejet des perturbations sur le modèle (L_vV) , les orties choisies étant la fraction molaire de propane en fond et celle du propane dans les vapeurs de tête, pour éviter le problème de dégénérescence de la matrice de découplage au point stationnaire. Comme pour la méthode précédente, les fractions molaires de propane sur les plateaux 2, 3 et n - 1 sont nécessaires à la commande : le contrôleur en dispose pendant les simulations (elles sont supposées parfaitement mesurées). Les trajectoires de référence sont linéaires du premier ordre, avec des constantes de temps de dix minutes. Là encore, un choix différent de ces constantes ne remet pas en question les conclusions exposés ci-dessous.

Commande linéaire d'un modèle réduit par la technique des réalisation équilibrées

Nous nous basons sur l'approximation tangente du modèle (L,V). Par la technique des réalisations équilibrés décrite au chapitre précédent, nous obtenons un modèle de dimension cinq, qui capte l'essentiel de la dynamique. Le changement linéaire de coordonnées nécessaire pour obtenir une réalisation équilibrée détruit le sens physique des états du modèle : il n'est plus question ici d'écart par rapport aux fractions molaires de propane à l'équilibre. Nous supposons donc que seules les sorties sont mesurées et construisons un observateur de type Luenberger pour estimer les cinq états du modèle.

Les commandes sont calculées par un retour d'état linéaire, solution d'un problème à critère quadratique sur un horizon infini. La matrice des gains est donc solution d'une équation de Ricatti. Les formes quadratiques affecteés aux entrées et aux sorties traduisent, outre une mise à l'échelle des variables, une pénalisation de la variation des sorties. Nous tolérons de fortes variations des commandes pourvu que les sorties restent proches de l'origine. Le gain de l'observateur est calculé par placement de pôles. Ceux-ci sont fixés au double de ceux du contrôleur, de sorte que la couvergence de l'observateur soit plus tapide.

Une étude en simulation de toutes les commandes linéaires proposées récemment nous aurait conduit trop loin. Nous considérons donc cette loi de commande comme un prototype des commandes de modèles linéaires réduits. A ce titre, les conclusions que nous tirons quant à ses performances doivent être comprises comme le minimum atteignable par de telles approches : robustesse correcte mais domaine de validité réduit parce que les non-linéarités ne sont pas prises en compte.

Commande non-linéaire d'un modèle réduit par agrégation des plateaux

Le modèle (L,V) complet est réduit par la technique d'agrégation des plateaux. Nous extrayons un modèle de dimension cinq en considérant les cinq compartiments suivants :

ballon de tête (plateau 1);

plateaux 2 à 13, les retenues sont transférées sur le plateau 13;

plateaux 14 à 29, les retenues sont transférées sur le plateau d'alimentation (plateau 21);

plateaux 30 à 41, les retenues sont transférées sur le plateau 30;

ballon de fond (plateau 42).

Les sorties sont les fractions molaires de propane dans le distillat et le résidu. La commande nécessite la connaissance des fractions molaires de propane sur les plateaux 13 et 30. Nous supposons qu'elles ne sont accessibles qu'à partir des températures mesurées sur ces plateaux.

8.1.3 Résultats

Chacune des commandes testées est implémentée dans le simulateur sous forme de système algébro-différentiel : le débit de reflux et la puissance de rebouillage sont appliquées au modèle de colonne de façon continue. En pratique, les commandes ne sont calculées que toutes les trois à six minutes ; nous ne simulons donc pas ici les effets liés à une discrétisation de la commande.

La perturbation retenue est une variation de la composition de l'alimentation : en 30 minutes, la fraction molaire de propane dans l'alimentation passe de 35 à 20%, alors que dans le même temps la fraction molaire de butane passe de 60 à 75%. Ce type de perturbation est courant sur site. Les consignes ne sont pas modifiés pendant la durée de la simulation.

Pour que les résultats soient significatifs, il nous faut considérer que les mesures des taux d'impureté ne sont pas disponibles instantanément. Nous synthétisons les résultats sur deux figures, représentant :

 pour la figure 8.1, les variations des taux d'impureté, communiquées au contrôleur avec deux minutes de retard;

pour la figure 8.2, les variations des taux d'impureté, communiquées au contrôleur avec trois minutes de retard.

Ces retards restent nettement inférieurs à ceux constatés en pratique, qui sont généralement supérieurs à dix minutes.

Première figure

- commande linéaire du modèle (L,V) complet : au bout d'environ une demi-heure, les sorties commencent à osciller de façon instable. En moins d'une heure, les variations des commandes deviennent très importantes et impensables sur site. Elles sont telles que le simulateur ne plus plus continuer à intégrer;
- commande non-linéaire du modèle (L,V) complet : ses performances sont très bonnes, surtout pour le produit de fond qui ne s'éloigne pas de la consigne fixée. En tête on relève un dépassement de 20% environ, mais la sortie rejoint sa consigne en une heure;
- commande du modèle linéaire réduit : les sorties s'éloignent beaucoup plus de leurs consignes, de 50% en tête jusqu'à plus de 100% en fond. Elles y retournent par oscillations amorties, en trois heures pour la tête et en guère plus d'une heure pour le fond;

 commande non-linéaire du modèle agrégé : les dépassements d'environ 20% sont de l'ordre de celui observé en tête pour la commande non-linéaire du modèle (L,V) complet. Le retour aux consignes est cependant plus lent et comparable en temps à celui obtenu par la commande du modèle linéaire réduit, quoiqu'il ait lieu dans ce cas sans oscillation.

Les commandes non-linéaires offrent dans ce cas de bonnes performances : faibles dépassements, retour aux consignes sans oscillations. La commande linéaire du modèle (L,V) complet est inefficace. Par contre, malgré de forts dépassements et un retour lent aux consignes, la commande linéaire du modèle réduit fonctionne. Notons le caratère asymptotique du rejet des pertubations pour les commandes de modèles réduits : il se traduit par un retour plus lent aux consignes.

Seconde figure

La commande linéaire du modèle (L,V) complet, déjà inefficace pour un retard de trois minutes, n'est pas représentée ici.

commande non-linéaire du modèle (L,V) complet : pour un retard de trois minutes, elle présente le même type de réponse que la commande linéaire du modèle (L,V) complet dans le cas précédent. Au bout d'une demi-heure, les sorties commencent à osciller de façon instable et, en moins d'une heure, les variations demandées sur les commandes sont telles que la simulation s'arrête;

 commande linéaire du modèle réduit : les dépassements observés (environ 50 % en tête et plus de 100%) en fond sont comparables au cas précédent. Toutefois le retour aux consignes, toujours par oscillations amorties, est plus lent : il s'effectue en quatre heures environ, au lieu de trois;

commande non-linéaire du modèle agrégé : les performances, tant du point de vue des dépassements (environ 20% en tête comme en fond) que du retour aux consignes (sans oscillation en trois heures environ) sont quasiment identiques à celles du cas précédent. L'augmentation d'une minute du retard n'a pas d'effet sensible sur les performances.

Les commandes de modèles réduits offrent des performances comparables au cas précédent, à l'exeption du temps de retour pour la commande linéaire. Par contre, la commande non-linéaire du modèle complet devient inefficace en présence d'un retard plus important.

Conclusions

Ce comportement des quatre lois de commande est reproductible en face d'autres perturbations, pour divers réglages des commandes et problèmes de capteurs. On peut noter toutefois une amélioration des performances des commandes linéaires quand les taux d'impureté choisis sont plus importants. Ces deux tests permettent d'affirmer que

 - la prise en compte des non-linéarités ne suffit pas pour la synthèse d'une commande robuste; - il est capital d'utiliser un modèle réduit de la dynamique pour gagner en robustesse. C'est alors seulement, qu'il est utile de prendre en compte les non-linéarités, afin d'améliorer la précision. En présence de très fortes perturbations, cette prise en compte devient nécessaire, car même la commande de modèles linéaires réduits devient dans ce cas inefficace.

Nous avons étudié -dans le cas réellement binaire- le spectre de l'approximation tangente quand les sorties de la colonne sont régulées par les commandes non-linéaires présentées cidesus. Rappelons qu'en boucle ouverte, le modèle (L,V) d'une colonne binaire possède une approximation tangente dont toutes les valeurs propres sont réelles et négatives. Sur la figure (8.3), les phénomènes suivants sont bien visible :

 - la commande non-linéaire du modèle complet tend à modifier l'ensemble du spectre. Elle implique notamment l'apparition de valeurs propres complexes conjuguées;

la commande non-linéaire du modèle réduit ne modifie que les plus grandes constantes de temps du système : ces résultats sont en accord avec la méthode de réduction présentée dans l'introduction de ce mémoire.

Le modèle (L,V) complet n'est pas celui qui sert pour simuler le fonctionnement de la colonne. En conséquence, et conformément aux commentaires de la page 99, celui-ci traduit mal les faibles constantes de temps du modèle, et les gains de la commande sont peu précis pour la compensation des phénomènes rapides, théoriquement garantie par la commande du modèle complet. Ceci n'est pas génant is les mesures sont intantanées -les performances de la commande du modèle non-linéaire complet sont excellentes dans ce cas-, mais devient redhibitoire dès que des retards sont introduits dans le bouclage.

8.2 Commande d'un modèle réduit de colonne pseudobinaire

Nous présentons dans cette section les performances de la commande d'un modèle réduit de colonne pseudo-binaire. La colonne est une stabilisation d'essences : le butane contenu dans l'alimentation est soutiné en têté de colonne, laissant en fond une essence plus lourde, donc stabilisée. Le but de la colonne est de réguler les taux d'impureté du pentane le plus léger (isopentane) dans le produit de tête et du butane le plus lourd (normal-botane) dans le produit de fond. La colonne a 38 plateaux et est alimentée au plateau 20 par un mélange très riche normal-pentane), plus des essences (nous employons ce terme pour désigner les molécules à plus de six carbones).

Pour simuler la dynamique d'une telle colonne par la méthode décrite dans la première partie du mémoire, il faut se baser sur un nombre raisonnable de composés. Le modèle algébrodifférentiel obtenu en décrivant les bilans de matière et d'énergie ainsi que l'hydrodynamique des plateaux et les régulations de base reste dans ce cas manipulable par le logiciel utilisé. A partir des chromatographies disponibles de l'alimentation, nous avons regroupé les isopentanes en un seul composé auquel nous avons attribué les caractéristiques de l'isopentane majoritaire dans l'alimentation. Nous avons réparti les molécules à plus de six atomes de carbone en deux "essences", et identifié leurs paramètres thermodynamiques par des sommes, pondérées par la teneur dans l'alimentation, des paramètres des composés originels. Cette méthode, dite de Plöcker, nous a permis de reproduire correctement le profil de température dans la colonne, estimé à partir de relevés de

- la température de tête;
- la température sur un plateau de la zone de rectification;
- la température sur un plateau de la zone d'épuisement;
- la température de fond.

Pour construire le modèle de commande, nous avons supposé que la colonne séparait un mélange de quatre composés :

un composé très léger, représentant l'éthane, le propane et l'isobutane;

un composé clé, le normal-butane;

l'autre composé clé, l'isopentane;

un composé très lourd, représentant le normal-pentane et les essences.

Le but d'un regroupement en quatre composés est de synthétiser une loi de commande utilisant seulement les quatre mesures de température citées ci-dessus. Nous avons ensuite écrit un modèle (L,V) complet de la dynamique de ces quatre composés. La commande est calculée sur le modèle réduit dérivé de ce modèle (L,V).

Dans le résultat que nous présentons, le débit d'alimentation a les caractéristiques d'un bruit blanc (figure (8.4)). La composition de l'alimentation est modifiée en deux heures :

- l'éthane passe de 0,5 à 1%;
- le propane passe de 6 à 9%;
- les butanes passent de 14 à 20%;
- les pentanes passent de 5,5 à 10%;
- l'essence légère passe de 53 à 50%,

l'essence lourde passe de 21 à 10%.

Cette variation de la composition de l'alimentation est importante. Dans le même temps, la température de l'alimentation chute de 10 degrés (396K à 386K). La commande est calculée toutes les trois minutes et

- les mesures de température sont retardées systématiquement de deux minutes et arrondies au dixième de degré;
- les mesures de composition sont retardées de quinze minutes;

les commandes calculées ne sont pas appliquées directement mais passent dans un filtre du premier ordre dont la constante de temps est fixée à 5 minutes;

la puissance de rebouillage communiquée au module de commande diffère de 10% de celle appliquée à la colonne.

A l'inverse de la section précédente, la commande est ici discrète. Ces caractéristiques sont représentatives des problèmes rencontrés sur site, quoique nous ayons exagéré volontairement les variations du débit de la charge et le retard des capteurs de température (les thermo-couples généralement utilisés n'introduisent pas de tels retards). La commande est appliquée à partir du temps 0 des relevés.

Sur la figure (8.5.), on peut constater que les performances sont acceptables et que les sorties sont régulées convenablement : elles s'éloignent momentamément de leurs consignes, mais y reviennent en un temps raisonnable. Les variations de l'alimentation sont perceptibles sur le relevé des températures (figure 8.6). Ce résultat montre la robustesse des lois de commande que nous proposons, mais révèle aussi ess limites (précision), dues au caractère asymptotique du rejet des perturbations. De telles commandes sont utilisées en rafinerie, nous le verrons au chapitre suivant. Elles ont remplacé, avantageusement au dire des utilisateurs, les commandes monovariables classiques par des boucles proportionnelles-intégrales puissance de rebouillage $\leftarrow \rightarrow$ température en épuissement.



Figure 8.1: Comparaison des lois de commande en présence d'un retard de deux minutes sur les sorties



Figure 8.2: Comparaison des lois de commande en présence d'un retard de trois minutes sur les sorties



Spectre de l'approximation tangente du système bouclé

Figure 8.3: Etude des spectres des systèmes en boucle fermée



Figure 8.4: Simulation de la commande d'une colonne pseudo-binaire



Fraction molaire d'isopentane dans le produit de tête

Fraction molaire de normal-butane dans le produit de fond



Figure 8.5: Simulation de la commande d'une colonne pseudo-binaire



Figure 8.6: Simulation de la commande d'une colonne pseudo-binaire

Chapitre 9

Résultats sur site

Dans ce chapitre, nous décrivons le programme COLBIN qui permet la commande des colonnes sur site. La première section fournit des détails sur le fonctionnement et la mise en place de ce programme. La seconde concerne la présentation et le commentaire de son fonctionnement sur une stabilisation d'essence et sur un dépropaniseur.

9.1 Le programme temps-réel COLBIN

Nos lois de commande non-linéaires de modèle réduits sont utilisées actuellement dans trois raffinerise de la société ELF-ANTAR France. Un programme temps réd, écrit en Fortran, en est le support. Ce programme s'appelle COLBIN, pour colonne binaire, dont la régulation était le but initial. Sa mise au point est le fruit d'une étroite collaboration entre le Centre Automatique et Systèmes de l'Ecole des Mines de Paris, représenté par P. Rouchon et l'auteur de ce mémoire, et la société ELF-ANTAR France, représenté principalement par Fari Djenab et Jean Laforét. COLBIN permet maintenant d'appréhender la commande en qualité des colonnes binaires et pseudo-binaires - il est installé sur des dépropaniseurs, des dééthaniseurs et des stabilisations d'essence.

9.1.1 Modes de fonctionnement

COLBIN peut utiliser pour la régulation en qualité des couples de commandes extraits de l'ensemble débit de reflux, débit de distillat, débit de résidu et puissance de rebouillage. Le couple débit de distillat-débit de résidu est exclu, à cause de la contrainte imposée par le bilan matière global.

Pour toute colonne existent des contraintes de circulation interne; il faut éviter par exemple l'engorgement et l'asséchement des plateaux. Ces contraintes sont traduites par des bornes, inférieures et supérieures, sur le débit de reflux et la puissance de rebouillage. Lorsqu'une contrainte devient active, COLBIN passe automatiquement en mode monovariable : la commande correspondant à la contrainte non-active est utilisée pour réguler la sortie prioritaire, définie par l'utilisateur. Le retour au mode multivariable a lieu dés l'inactivation des contraintes. Ce mode de fonctionnement permet d'éviter les débouclages et correspond à un souhait des utilisateurs. COLBIN est utilisable en mode monvariable ; dans ce cas l'utilisateur doit préciser quelle commande il souhaite employer.

9.1.2 Mise en place

COLBIN fournit à des intervalles de temps réguliers (de 3 à 6 minutes) les nouvelles commandes. En dehors des consignes pour les sorties, les variables suivantes sont utilisées :

le débit de charge et sa fraction vaporisée;

- les débits de distillat et de résidu;
- les fractions molaires d'impureté dans les deux sorties;
- les températures sur le plateau de tête et le plateau de fond;
- la température sur un plateau dans la zone de rectification;

la température sur un plateau dans la zone d'épuisement ;

la pression en tête de colonne.

La mise en place du logiciel est simple. Il faut disposer d'enregistrements du fonctionnement de la colonne sur une période de temps assez longue. Couplés à des renseignements disponibles (le nombre de plateaux, leur géométrie, les composés présents, ...), ces enregistrements sont suffisants pour initialiser COLBIN, en particulier les termes intégraux. Nous évitons la phase délicate d'identification de paramètres à partir des réponses de l'unité à des excitations calbrées.

Après un accueil mitigé. COLBIN est maintenant considéré par les opérateurs des raffineries françaises de ELF-ANTAR France comme un outil fiable et performant : la confiance dans le bon fonctionnement du logiciel les incinte à focaliser leur attention sur des unités plus sensibles : réacteurs, colonnes de brut ... Pour les colonnes équipées, seules des modifications de consignes, espacées, leur demandent du temps. L'essentiel des débouclages est lis à des pannes d'ordinateurs et il convient maintenant d'être attentif au problène suivant : quelles connaissances faut-il maintenir pour être capable, le cas échéant, de conduire les colonnes en débit de reflux et puissance de rebouïlage.

9.2 Résultats sur site

Pour illustrer le fonctionnement du logiciel, nous avons choisi de reproduire, avec l'accord de ELF-ANTAR France, une journée du fonctionnement d'un dépropaniseur et d'une stabilisation. d'essences, deux colonnes situées à la raffinerie de Grandpuits (Seine et Marne).

9.2.1 La stabilisation des essences

C'est une colonne pseudo-binaire de 32 plateaux fonctionnant sous une pression de 10 bars. Elle permet de débarrasser l'essence de ses composés plus légers que le pentane. Les deux composés clés sont ainsi le normal-butane, le plus lourd des butanes, et l'isopentane, le plus léger des pentanes.

Pendant la journée qui nous intéresse, l'alimentation de la colonne subit de brusques variations, tant en débit qu'en composition -figure (9.1).- Elles se retrouvent sur les entrées -figure (9.2)-. Les consignes sont respectées en moyenne (0,8% molaire de normal-butane dans le produit de fond et 0,2% d'isopentane dans le produit de tête). Le caractère asymptotique du rejet est bien visible aux alentours de la huitime heure, quand on tieu les plus fortes variations -figure (9.3)-. Le fait que la composition de la charge ait changé est détectable si les températures des extrémités -figure (9.4)- sont examinées en même temps que les taux d'impurét é dans les produits. En effet, pour des taux d'impurét é sensiblement identiques, la température de tête se stabilise trois degrés en dessous, celle du fond environ deux degrés endessous.

Ces performances sont jugées bonnes par les utilisateurs. Notons toutefois que la précision de la commande est bien entendu fortement liée à la précision des capteurs, qui posent souvent des problèmes de décalages et de précision (débitmètres) ou de retards (chromatographes).

9.2.2 Le dépropaniseur

Le produit de tête de la stabilisation d'essences précédemment décrite alimente un dééthaniseur. Celui-ci est aussi équipé de COLBIN et donne de bons résultats. Mais son fonctionnement, monovariable, est moins intéressant dans le cadre de cette présentation (le distillat, vaporisé, a un débit trop faible pour servir à la commande; c'est le débit de reflux qui permet la régulation du niveau de tête). Le produit de fond de cette colonne est majoritairement un mélange de propane et de butane, auquel s'ajoutent en faibles proportions (quelques pourcents molaires) de l'éthane et du pentane. Ce produit est une partie de l'alimentation du dépropanieur dont le fonctionnement est discuté dans cette section.

Sur 42 plateaux et sous une pression de 15 bars, le dépropaniseur permet de séparer le butane du propane. Pendant les vingt quatre heures, le débit de l'alimentation est modérément variable – figure (9.5)-. Le fait le plus marquant est la brusque impulsion autour de la huitième heure, due à un changement des tamis. Les variations de l'énergie de l'alimentation, révélées par les changements de température, ont en fait une influence plus importante sur les aspects énergétiques.

Coté sorties –figure (9.6)–, on remarque une meilleure régulation de la composition du résidu. Approximativement entre la dixième et la quinizième heure, la contrainte de maximum sur la puissance de rebouillage est active –figure (9.7) – : la régulation passe en monovariable avec pour objectif la sortie de fond, prioritaire. Suite à une baisse du débit de charge, la commande multivariable redevient possible vers la quinzième heure : COLBIN abandonne automatiquement le mode monovariable et corrige très rapidement la sortie de tête.



Figure 9.1: Résultats sur site : stabilisation d'essences



Figure 9.2: Résultats sur site : stabilisation d'essences





Figure 9.4: Résultats sur site : stabilisation d'essences



Figure 9.5: Résultats sur site : dépropaniseur



Figure 9.6: Résultats sur site : dépropaniseur



Figure 9.7: Résultats sur site : dépropaniseur

Chapitre 10

Commande d'un réseau de colonnes

Le but de ce chapitre est de fournir un exemple de l'utilité de notre approche en étudiant un procédé à deux colonnes couplées, utilisé pour la distillation des essences. Une première section décrit la complexité du procédé réel. Vient ensuite une description minimale de sa dynamique, qui nous permet de bâtir des modèles de taille raisonnable pour la simulation et la synthèse de lois de commande. Nous verrons qu'il est possible de construire une loi de commande originale à partir d'un modèle agrégé. Cette loi de commande multivariable, impliquant quatre entrées et quate sorties, se révèle robuste.

10.1 Description du procédé sur site

10.1.1 Mélange à séparer et schéma de séparation

Le mélange à séparer est très riche, puisqu'il implique cent à deux cents constituants, dont le nombre d'atomes de carbone par molécule varie de cinq à dix. Pour un nombre d'atomes de carbone donné, les familles suivantes sont présentes :

- paraffines;
 - isoparaffines
 - naphtènes,
- aromatiques;
- olefines;
- cyclo-oléfines;
- styréniques.

Le schéma de fonctionnement du couple de colonnes est représenté sur la figure (10.1.1). Le mélange à séparer entre dans la première colonne (appelée splitter), sur un étage proche du fond. Un soutirage, dans le tiers supérieur, permet d'alimenter la seconde colonne (appelée stripper). Le flux de vapeur sortant en tête du stripper est réinjecté dans le splitter sur le plateau de recyclage, situé juste au-dessus du plateau de soutirage. Ce shéma de fonctionnement permet d'obtenir trois produits :

 - une essence légère, en tête de splitter. Elle contient des composés à cinq ou six atomes de carbone par molécule;

une essence moyenne, en fond de stripper. Elle contient des composés dont le nombre d'atomes de carbone par molécule varie de cinq à huit;

 - une essence lourde, en fond de splitter. Elle contient des composés dont le nombre d'atomes de carbone par molécule varie de sept à dix.

10.1.2 Variables de commande et variables à commander

Les variables à commander sont .

- Pour le splitter :
 - la pression de tête;
 - le niveau de tête;
 - le niveau de fond;
 - la composition du produit de tête et celle du produit de fond;
- Pour le stripper :
 - le niveau de fond;
 - la composition du produit de fond.

Le débit et la composition de la charge ne sont pas manipulables. Par contre, l'utilisateur dispose ..

- .. pour le splitter, de
 - la puissance de condensation des vapeurs de tête;
 - la puissance de rebouillage;
 - le débit de distillat;
 - le débit de résidu;
 - le débit de reflux;
 - le débit de soutirage;
- . pour le stripper, de

- la puissance de rebouillage;
- le débit de résidu.

Notons que :

la pression dans le stripper est indirectement régulée par la pression en tête de splitter

le flux de liquide qui permet le contre-courant dans le stripper est généré par l'alimentation à l'extremité supérieure. On ne trouve donc ni ballon, ni reflux en tête de stripper.

10.1.3 Régulations de base et commande en qualité

Régulations de base

Classiquement, la commande est hiérarchisée : les niveaux et la pression en tête de splitter sont régulés par des boucles rapides de type proportionnel-intégral. La commande en qualité, plus lente, intervient au niveau supérieur. Les boucles de base sont :

- pour le splitter,
 - pression de tête ←→ puissance de condensation;
 - niveau de tête ↔ débit de distillat;
 - niveau de fond ↔ débit de résidu;

pour le stripper, niveau de fond - débit de résidu.

Les quatre commandes disponibles pour la commande en qualité sont donc :

le débit de reflux;

- le débit de soutirage;
- la puissance de rebouillage du splitter;
- la puissance de rebouillage du stripper.

Commande en qualité

Actuellement, le but de la régulation en qualité est

- de maximiser le taux des composés à six carbones (communément appelés les C6) dans l'essence légère tout en restant en-dessous d'un seuil fixé à l'avance;
- parallélement, de maintenir l'essence moyenne dans une plage de composition caractérisée par un "point 95%" (température pour laquelle 95% du mélange est distillé dans un appareil normalisé).

L'essence lourde n'est pas spécifiée. On cherche donc à réguler seulement deux sorties. Dans la suite de cette étude, nous allons transformer ces objectifs pour tirer parti des quatre commandes disponibles.

10.2 Description minimale du procédé

10.2.1 Agrégation des composés

La simulation dynamique d'un tel procédé implique le développement de modèles difficiement manipulables, étant donné le nombre important de constituants du mélange à séparer. Notre premier objectif est de représenter ce mélange par un nombre minimal de composés, susceptibles de représenter l'essentiel de la dynamique du procédé. Nous avons chois de retenir quatre composés, dont les propriétés thermodynamiques sont déduites de celles des composés qui mélange original. Dans la suite, nous repérerons ces composés par les dénominations suivantes :

- le composé léger, qui correspond approximativement aux C5;
- le composé moyen, qui correspond approximativement aux C6;
- le composé lourd, qui correspond approximativement aux C7 et aux plus légers des C8;
- le composé très lourd (ou lourd plus), qui engloble des C8, les C9 et C10.

Qualitativement, nous pouvons observer que :

le composé très lourd ne monte pas dans la colonne au-dessus du plateau d'alimentation.
 Il sort dans le produit de fond du splitter.

inversement, le composé léger ne descend pas au-dessous du plateau d'alimentation. Il est par contre en partie soutiré : on le trouve donc majoritairement dans le produit de tête du splitter mais il est présent aussi dans le produit de fond du stripper;

- le composé moyen est présent dans les deux colonnes. S'il sort majoritairement dans le produit de fond du stripper, il est présent à la fois dans les produits de tête et de fond du splitter.
- enfin, seules des traces du composé lourd sont observables sur les plateaux situés au-dessus du plateau de recyclage. Celui-ci sort majoritairement dans le produit de fond du splitter mais intervient pour 20 à 30% dans la composition du produit de fond de stripper.

La figure (10.2.1) résume ces comportements qualitatifs.

10.2.2 Objectif de la commande en qualité

Partant de ces observations, nous nous sommes attachés à l'objectif de commande suivant :

- régulation du taux de composé moyen dans le produit de tête du splitter;
- régulation du taux de composé moyen dans le produit de fond du splitter;
- régulation des taux des composés léger et lourd dans le produit de fond du stripper.

Nous ajoutons ainsi une spécification du produit de fond de splitter. Notons par ailleurs que la double spécification du produit de fond du stripper doit permette de traduire correctement en termes de fractions molaires la spécification en termes de "point 95%" La commande disponible du stripper (puissance de rebouillage) ne peut servir qu'à évacurer un surplus du composé léger. Ceci implique qu'il est nécessaire de réguler le taux du composé lourd sur le plateau de soutirage, pour qu'en fond du stripper il puisse se stabiliser à la consigne fixée.

10.3 Ecriture d'un modèle de commande

Etant donné la complexité du système, nous n'avons pas pu démontrer de propriétés intéressantes vérifiées par les modèles le décrivant (unicité du point stationnaire, stabilité en boucle ouverte ...). L'extension que nous proposons est donc formelle. Dans cette section, nous écrivons un modèle (L/V) agrégé pour décrine le fonctionnement dynamique du couple de colonnes.

10.3.1 Description des flux totaux internes

Nous appelons :

- F le débit d'alimentation;
- L₁ le débit de reflux du splitter;
- L2 le débit liquide soutiré au splitter, soit l'alimentation du stripper;
- V₁ le débit de vapeur en fond de splitter;
 - V₂ le débit de vapeur en fond de stripper.

10.3.2 Agrégation

Nous avons choisi, en fonction des flux internes, d'agréger l'ensemble en cinq compartiments :

 la totalité du stripper constitue un compartiment. Les retenues sont transférées sur un plateau proche de la tête (plateau t). Le ballon de fond est le plateau nl;

- la partie haute du splitter, c'est à dire le ballon de reflux (plateau 1) et les plateaux de la tête jusqu'au recyclage inclus, forme le compartiment de rectification. Les retenues sont transférées sur un plateau en rectification (plateau r);
- la partie basse du splitter, c'est à dire le ballon de fond (plateau n) et les plateaux jusqu'au plateau e, forme le compartiment d'épuisement. Les retenues sont transférées sur le plateau e (le plus haut);
- le plateau de soutirage (plateau s) et les plateaux en-dessous, jusqu'au plateau m, forment le compartiment médian, les retenues étant tranférées sur le plateau m (le plus bas);
- les plateaux m+1 à e 1 forment le dernier compartiment. Les retenues sont transférées sur le plateau d'alimentation.

10.3.3 Equations de la commande

Notons x (respectivement y) les fractions molaires dans le liquide (resp. dans la vapeur) pour le stripper. Pour le stripper, nous notons χ (resp. γ) les fractions molaires dans le liquide (resp. dans la vapeur). La structure du modèle agrégé permet d'écrire

$$x_1 = S_1(x_r, L_1, V_1, V_2)$$

 $\chi_{nt} = S_2(\chi_t, L_2, V_2)$
 $x_n = S_4(x_e, L_1, V_1, L_2, F)$

Pour ces trois zones, les calculs sont tout à fait standards. Au plateau de soutirage, nous avons

$$L_1x_{s-1} + V_1y_{s+1} - L_1x_s - V_1y_s = 0.$$

L'agrégation nous donne y_{s+1} comme une fonction de x_s, x_m, L_1, V_1 et L_2 . Par contre, il est difficile d'obtenir x_{s-1} . En fait, il existe plusieurs façons d'outrepasser ce problème. Nous les avons testées en simulation afin de sélectionner la plus performante, qui s'avère être la suivante.

Il est possible d'exprimer toutes les fractions molaires du compartiment médian en utilisant

$$y_{j+1} = y_{s+1} + \frac{L_1 - L_2}{V_1}(x_j - x_s).$$

Nous sommes ainsi ramenés au problème de l'estimation de x_s et y_{s+1} . Des approximations sont nécessaires et c'est ici qu'intervient le savoir-faire accumulé lors de l'étude des colonnes pseudo-binaries. Soit ε un petit réel positif. Nous supposons que

- (i) dans le stripper, les équilibres thermodynamiques sont tels que γ^L = εχ^L, où l'exposant L rapporte au composé lourd;
- (ii) dans le compartiment médian du splitter, les équilibres thermodynamiques sont tels que x^l = εy^l, où l'exposant l rapporte au composé léger;
- (iii) le distillat du splitter ne contient pas de composé lourd.

Estimation de x_s Le modèle thermodynamique du compartiment médian est ternaire. Nous connaissons χ_{at}^L Par l'hypothèse (i), nous obtenons pour $\varepsilon = 0$

$$x_s^L = \left(1 - \frac{V_2}{L_2}\right) \chi_{nt}^L$$
, (10.1)

qui nous fournit la fraction molaire du composé lourd au soutirage. Par x_s^L et la température T_s , nous pouvons connaitre x_s entièrement, grâce aux relations d'équilibre thermodynamique.

Estimation de y_{s+1} L'hypothèse (ii) nous donne, pour $\varepsilon = 0$, $y_s^l = y_{s+1}^l$. Or, nous connaissons x_s et pouvons calculer y_s . L'hypothèse (iii) nous permet d'écrire pour le point stationnaire

$$(L_2 - V_2)\chi_{nt}^L + (L_1 - L_2)x_s^L = V_1y_{s+1}^L$$

Utilisant l'hypothèse (i) pour $\varepsilon = 0$ (voir (10.1)), cette équation devient

$$y_{s+1}^{L} = \frac{L_1}{V_1}x_s^{L}$$
,

qui nous fournit y_{s+1}^L . Notre estimation de y_{s+1} est complète.

10.3.4 Synthèse par les températures

La commande est calculée en inversant les équations précédentes. Là aussi, les fractions molaires non-mesurées sont toutes estimables si l'on dispose des températures suivantes :

- T₂, température en tête de splitter;
- T_r, température dans le compartiment de rectification du splitter;
- T_s, température au soutirage;
- T_m, température à l'extrémité inférieure du compartiment médian du splitter;
 - Te, température à l'extrémité supérieure du compartiment d'épuisement du splitter;
 - T_n , température en fond de splitter;
- T_t, température dans le compartiment d'épuisement du stripper;
- T_{nt}, température en fond du stripper.

10.4 Performances de la commande

Nous présentons dans cette section la réponse simulée des deux colonnes à une perturbation du débit de charge, qui baisse de moitié en une demi-heure. Les sorties sont mesurées avec un retard de quixpare minutes et les températures avec un retard de deux minutes. Le modèle de simulation, qui comporte uniquement quatre composés, a été construit selon les règles établies dans le second chapitre de ce mémoire : il prend en compte les phénomènes énergétiques et hydrauliques.

Sur la figure (10.3), on note que le taux d'impureté du moyen est correctement régulé, en tête et en fond de splitter. Etant donnée la consigne importante pour le composé lourd en fond de stripper, la fraction molaire de léger y est moins facilement régulée, encore que les performances soient là-aussi tout à fait acceptables –figure (10.4) – : la commande proposée est robuste via-à-vis des retards.

D'autres simulations non présentées ici donnent également de bons résultats et valident la structure de la loi de commande que nous proposons.

Représentation des composés L'étude présentée est relative à un modèle simplifié à quatre composés, ce qui ne peut prétendre finement la réalité. Se pose donc un problème de la représentation des composés. La méthode utilisée jusqu'ici, notamment pour la représentation des essences dans les stabilisations, fournissait de bons résultats. Nous n'avons pas eu le temps d'étudier complétement cette question, mais des études préalables nous ont montré qu'il convenait d'être très atteutif à cette phase d'étaboration de la loi de commande.

Cette structure de loi de commande sera prochainement testée sur un site industriel.



Figure 10.1: Schéma de fonctionnement du couple splitter-stripper


Figure 10.2: Comportement qualitatif des quatre composés agrégés



Fraction molaire du composé moyen en tête de splitter

Fraction molaire du composé moyen en fond de splitter



Figure 10.3: Commande du couple splitter-stripper



Fraction molaire du composé léger en fond de stripper

Fraction molaire du composé lourd en fond de stripper



Figure 10.4: Commande du couple splitter-stripper

Chapitre 11

Conclusion

Par cette thèse, nous étendons l'approche introduite par Lévine et Rouchon pour la commande des colonnes binaires.

Une généralisation de leur approche pour les colonnes multicomposées est très difficule quand aucune hypothèse n'est posée sur le comportement des composés. Cette difficulté se traduit par la méconnaissance des propriétés des modèles. L'unicité des points stationnaires des modèles (L,V) n'est pas démontrée; notre contribution est la démonstration d'une propriété vérifiée dans ce cas par le jacobien des fonctions d'équilibre. Au vu des tentatives commentées, il nous semble que cette propriété sers utile pour des études utlérieures. La question de la ababilité en boucle ouvert e rest en grande partie non résolue; notre contribution concerne ici une plus fine caractérisation de la dynamique du flash. Nous espérons qu'elle pourra servir de base à de nouvelles approches du problème.

Devant ces difficultés, il nous a paru judicieux de restreindre nos travaux aux colonnes pseudo-binaires. Nous fondant sur une nouvelle méthode de réduction, nous construisons des modèles de la dynamique et montrons qu'ils sont stables en boucle ouverte et qu'ils admettent un unique point stationnaire. Nous pouvons alors utiliser rigoureusement la technique d'agrégation des plateaux et démontrer d'intéressantes propriétés vérifiées par le modèle réduit. Les questions de l'existence et des propriétés des lois de rejet de pertubations sur ces modèles restent toutefois délicates : nous avons pu démonter seulement un résultat d'existence de telles lois. Les simulations et les résultats sur site sont néammoins tout à fait rassurants quant à leurs performances, et permettent d'envisager sous un angle nouveau la commande de procédés plus complexes, comme l'illuster l'étude du spiliert-stripper d'essences.

La conclusion à notre sens le plus importante de cette thèse concerne la place fondamentale qu'il faut accorder à la modélisation pour la commande, et qui se traduit ici par la nécessité de ne pas prendre en compte les phénomènes rapides et stables. Pour reprendre l'introduction, cette attention constitue à notre avis une approche plus intrinsèque des problèmes de robustesse. Il reste là beaucoup à faire, notamment dans l'éclaircissement des liens avec les études dans le cas linéaire.

С

Annexes

Annexe A

Géométrie de la dynamique du flash

Dans cette annexe¹, nous reprenons et étendons un résultat présenté par Pierre Rouchon dans sa thèse (98); nous étudions qualitativement la dynanique d'un faba dalbabique pour lequel la pression et les rétentions liquide et vapeur sont fixées. Si l'équilibre thermodynamique est stable, le système d'équations différentielles ordinaires décrivant la dynamique puei ètre interprété comme un système gradient sur une variété riemannieme pour laquelle la métrique dérive des matrices hessiennes des entropies et le potentiel est la production d'entropie. Quand l'alimentation est constante, une telle interprétation assure la stabilité asymptotique et prouve la convergence sans oscillations vers le point stationnaire, où la production d'entropie est minimale.

Nous commençons par une formalisation adéquate de l'équilibre thermodynamique. Nous présentons ensuite le modèle algébro-différentiel du flash et construisons un système différentiel équivalent. Finalement, la structure riemannienne et l'interprétation sous forme de système gradient sont décrites.

A.1 Préliminaires thermodynamiques

Cette section est consacrée à une formalisation inhabituelle mais pratique des relations d'équilibre thermodynamique.

Nous notons, pour un mélange homogène de constituants, S l'entropie, $N = (N_1, ..., N_c)$ les nombres de moles, H l'enthalpie, v le volume, P la pression, T la température et μ , le potentiel chimique du constituant i. Comme la pression est considérée par la suite comme un paramètre, un ensemble adapté de variables indépendantes est H, N et P. L'entropie S est donc considérée comme une fonction de H, N et P satisfiant la relation différentielle

$$TdS = dH - \sum_{i=1}^{c} \mu_i dN_i - v dP. \qquad (A.1)$$

¹Pour l'essentiel, cette annexe est la traduction en français de l'article "Geometry of the flash dynamics" par P. Rouchon et Y. Creff [100].

Considérons maintenant un système fermé de c constituants maintenu à la pression P et ne recevant de l'extérieur ni chaleur ni masse. Le second principe de la thermodynamique stipule que le système tend vers un état d'équilibre pour lequel l'entropie est maximale sous les contraintes de constance de l'enthalpie H et des retenues N. Notons p le nombre possible de phases. L'équilibre thermodynamique est ados obtenu en résolvant le probleme d'optimisation

$$\max_{\substack{H^1, N^1, \dots, H^p, N^p \\ \sum_{j=1}^p H^j = H, \sum_{j=1}^p N^j = N}} \left(\sum_{j=1}^p S^j(H^j, N^j, P) \right)$$

où l'exposant j est relatif à la phase j. Si la phase j est absente à l'équilibre, N^{j} et H^{j} valent 0. Si les p phases possibles sont présentes à l'équilibre, nous pouvons écrire, pour tout j et tout k appartenna à $\{1, ..., p\}$, l'égalité des dérivées premières de S' et S^{k} :

$$\frac{\partial S^{j}}{\partial H^{j}} = \frac{\partial S^{k}}{\partial H^{k}}$$
 et $\frac{\partial S^{j}}{\partial N^{j}} = \frac{\partial S^{k}}{\partial N^{k}}$ (A.2)

Ces conditions d'équilibre sont équivalentes aux conditions classiques d'égalité des températures et des potentiels chimiques dans toutes les phases.

Les équations d'équilibre (A.2) associées aux contraintes de conservation $H = \sum H^{j}$ et $N = \sum N^{j}$ ne permettent pas d'assurer que l'entropie est maximale. Elles veulent simplement dire que sa première variation, δ^{2} , est nulle. Si sa seconde variation, δ^{2} , est négative, cet extremum est un maximum (local). Avec les conditions de stabilité de chaque phase j, de telles conditions sur δ^{2} sont appelés conditions de stabilité thermodynamique :

$$D^2S^j \le 0$$
 et $D^2S^j + D^2S^k < 0$ (A.3)

pour toutes phases j et k ($j \neq k$) et où D^2S^j est la matrice hessienne de l'entropie S^j par rapport aux variables extensives (N^j, H^j) . Remarquons que $D^2S^j \leq 0$ provient de la condition de stabilité de la phase j.

Dans la suite, nous considérons uniquement des équilibres liquide-vapeur. Les phases liquide et vapeur seront respectivement distinguées par les exposants l et v.

Nous nous plaçons sous l'hypothèse suivante de stabilité thermodynamique :

TS: l'équilibre liquide-vapeur est thermodynamiquement stable :

 $D^2S^l \le 0$, $D^2S^u \le 0$ et $D^2S^l + D^2S^u < 0$,

les rangs de D²Sⁱ et D²S^v valant c.

Comme la dépendance de S^2 par rapport à H^2 et N^2 est homogène de degré un, nous avons les identités d'Euler (voir les rappels à la fin de l'annexe), classiquement appelées relations de Gibbs-Duhem :

$$S^{j}(H^{j}, N^{j}, P) = DS^{j}(H^{j}, N^{j}, P) \cdot (H^{j}, N^{j})$$

 $0 = D^{2}S^{j}(H^{j}, N^{j}, P) \cdot (H^{j}, N^{j})$
(A.4)



Figure A.1: Un flash adiabatique où la pression et les volumes sont constants.

où DS^{j} et $D^{2}S^{j}$ représentent respectivement les dérivées première et seconde de S^{j} par rapport aux variables extensives (H^{j}, N^{j}) (j = l, v) et où le point "." correspond à l'évaluation des opérateurs linéaires. Notons que la condition de rang dans les hypothèses **TS** signifie que la concavité de S^{j} est stricte excepté dans la direction de (H^{j}, N^{j}) .

Pour les mélanges azéotropiques où les compositions des phases liquide et vapeur sont identiques, **TS** reste vrai en général étant donnée la dépendance en les enthalpies H^l et H^v de S^l et S^v . Dans des conditions critiques, où les deux phases deviennent indistinguables, $D^2S^l + D^2S^v$ n'est plus définie négative, et **TS** n'est plus satisfaite.

A.2 Modèle algébro-différentiel

Considérons le flash adiabatique représenté sur la figure A.1. Supposons que :

- la pression, les volumes liquide et vapeur sont constants (régulateurs de pression et de niveau parfaits);
- les phases liquide et vapeur sont parfaitement mélangées et à l'équilibre thermodynamique;
- l'équilibre thermodynamique satisfait les relations TS indépendamment du temps.

Le comportement dynamique de ce système est déduit, d'une part des équations différentielles de bilan matière et énergie, d'autre part des équations algébriques de l'équilibre thermodynamique et des régulations :

$$\begin{cases}
\frac{dR'}{dt} + \frac{dR'}{dt} = F - L - V \\
R' = \frac{v'(R')}{v'(L)}L = \frac{\overline{v'}}{v'(L)}L \\
R'' = \frac{v'(R'')}{v'(V)}V = \frac{\overline{v'}}{v''(V)}V \\
DS'(R') = DS'(R')
\end{cases}$$
(A.5)

où

 $F = (F_1, ..., F_c, F_{HI})$ correspond au flux d'entrée matière et énergie (c est le nombre de constituants);

- L = (L₁,..., L_c, L_{H^l}) (resp. V = (V₁,..., V_c, V_{H*})) correspond au flux liquide (resp. vapeur) de sortie;

 $R^{l} = (R^{l}_{1}, \dots, R^{l}_{c}, R_{H^{l}})$ (resp. $R^{v} = (R^{v}_{1}, \dots, R^{v}_{c}, R_{H^{v}})$) correspond aux rétentions dans le liquide (resp. dans la vapeur);

 S^l (resp. S^v) est l'entropie du liquide (resp. de la vapeur). DS^l (resp. DS^v) est la dérivée première de S^l (resp. S^v) par rapport à R^l (resp. R^v);

 v^{l} (resp. v^{v}) est la fonction volume liquide (resp. vapeur) (voir, à la section précédente, l'équation (A.1)); $v^{l}(L)$ (resp. $v^{v}(V)$) est le flux volumique de liquide (resp. de vapeur) ;

- vⁱ (resp. v^v) est le volume liquide (resp. vapeur), supposé constant.

La seconde (resp. troisième) équation de (A.5) assure simultanément que

 la retenue liquide (resp. vapeur) a la même composition que le flux de liquide (resp. de vapeur) sortant du flash;

la retenue liquide (resp. vapeur) est constante.

Dans (A.5), nous n'avons pas rappelé la dépendance par rapport à la pression de S^i , S^v , v^i et v^v : celle-ci est effet supposée constante. Remarquons que le nombre d'inconnues (R^i , R^e , L et V), 4(c + 1), est égal au nombre d'équations. Remarquons aussi qu'en raison de l'homogénéité, il est possible de considérer indépendamment $v^i(R^i)$ et $v^i(L)$, $v^i(R^o)$ et $v^i(V)$.

A.3 Passage à un système différentiel

Pour des raisons de clarté, la dépendance des différentielles par rapport à R^i et R^v ne sont rappelées que lorsqu'un doute est possible. Notons $\tau^l(L) = \frac{\overline{v}^l}{\overline{v}(L)}$ et $\tau^v(V) = \frac{\overline{v}^v}{\overline{v}^v(V)}$ les temps de séjour dans le liquide et dans la vapeur. Nous avons $R^i = \tau^i(L) L$, $R^v = \tau^v(V) V$ La première difficulté provient du caractère implicite du système algébro-différentiel (A.5). La notion d'index permet de mesurer ce caractère implicite. Ici, le système est d'index 2. Pour plus de détails, consulter Sincovec et al [110] pour les systèmes linéaires et Fliess, Lévine et Rouchon [30, 31] pour les systèmes implicites généraux.

Le modèle (A.5) peut être réécrit explicitement de la façon suivante.

Lemme 9 Les solutions de (A.5) coincident avec les solutions du système différentiel ordinaire

$$\begin{bmatrix} \frac{dR^i}{dt} = [D^2S^l + D^2S^v]^{-1} D^2S^v \left(F - \frac{R^i}{\tau^l} - \frac{R^v}{\tau^v}\right) \\ \frac{dR^v}{dt} = [D^2S^l + D^2S^v]^{-1} D^2S^l \left(F - \frac{R^i}{\tau^l} - \frac{R^v}{\tau^v}\right) \quad (A.6)$$

avec

$$\begin{cases} \frac{1}{\tau^{i}} = \frac{Dv^{i} \left[D^{2}S^{i} + D^{2}S^{*}\right]^{-1}}{\overline{v}^{i}} \frac{D^{2}S^{*} \cdot F}{\overline{v}^{i}} \\ \frac{1}{\tau^{*}} = \frac{Dv^{*} \left[D^{2}S^{i} + D^{2}S^{*}\right]^{-1}}{\overline{v}^{*}} \frac{D^{2}S^{i} \cdot F}{\overline{v}^{*}}. \end{cases}$$
(A.7)

pour des conditions initiales (R_0^l, R_0^v) satisfaisant

$$DS^{l}(R_{0}^{l}) = DS^{v}(R_{0}^{v}), \quad v^{l}(R_{0}^{l}) = \overline{v}^{l} \quad et \quad v^{v}(R_{0}^{v}) = \overline{v}^{t}$$

Preuve Nous avons

$$D^2S^l(R^l) \cdot \frac{dR^l}{dt} = D^2S^v(R^v) \cdot \frac{dR^v}{dt}$$

L'hypothèse TS implique que $D^2S^l + D^2S^v$ est une matrice régulière. Alors

$$\begin{cases}
\frac{dR'}{dt} = [D^2S' + D^2S']^{-1} \quad D^2S'' \cdot \frac{dR}{dt} \\
\frac{dR''}{dt} = [D^2S' + D^2S']^{-1} \quad D^2S' \cdot \frac{dR}{dt}
\end{cases}$$

où $R = R^l + R^v$ et $\frac{dR}{dt} = F - L - V = F - \frac{R^l}{\tau^l} - \frac{R^v}{\tau^v}$.

Il reste à exprimer τ^l et τ^v comme des fonctions de R^l , R^v , \overline{v}^l , \overline{v}^v et F. Détaillons le calcul pour τ^l Comme le volume liquide est constant, nous avons

$$Dv^l \cdot \frac{dR^l}{dt} = 0,$$

soit

$$Dv^{l} [D^{2}S^{l} + D^{2}S^{v}]^{-1} D^{2}S^{v} \cdot (F - \frac{R^{l}}{\tau^{l}} - \frac{R^{v}}{\tau^{v}}) = 0.$$



Figure A.2: Le comportement dynamique du flash adiabatique est décrit par un système gradient sur la variété riemannienne Σ . Le potentiel est la production d'entropie W

Les relations de Gibbs-Duhem impliquent que $D^2S^v \cdot R^v = 0$, d'où

$$\frac{1}{\tau^{l}} = \frac{Dv^{l} \left[D^{2}S^{l} + D^{2}S^{v}\right]^{-1} D^{2}S^{v} \cdot F}{Dv^{l} \cdot \left[D^{2}S^{l} + D^{2}S^{v}\right]^{-1} \cdot D^{2}S^{v} \cdot R^{l}}$$

Pour la même raison, $[D^2S^l + D^2S^v]$ $R^l = D^2S^v \cdot R^l$, soit

$$[D^2S^l + D^2S^v]^{-1}$$
 $D^2S^v \cdot R^l = R^l$

Comme

$$Dv^l \cdot R^l = v^l(R^l) = \overline{v}^l$$
,

nous obtenons (A.7) pour l'expression de $\frac{1}{\sigma^l}$.

A.4 Interprétation comme système gradient

Comme le montre la figure A.2, nous allons prouver que le système dynamique décrit par (A.5) est un système gradient sur une variété riemannienne (voir les rappels à la fin de l'annexe).

A.4.1 Structure riemannienne

La construction suivante est faite dans l'esprit de la formulation des équilibres thermodynamiques proposée par Weinhold [132]. Cependant, nous ne considérons pas directement l'espace de Gibbs de l'entropie, du nombre de moles et du volume. L'espace de base dans lequel est plongée notre variété d'équilibre est le produit cartésien $]0, +\infty[^{c+1}\times]0, +\infty[^{c+1}$ de l'espace des rétentions liquide par l'espace des rétentions vapeur.

Considérons la sous-variété Σ de $]0, +\infty[c+1\times]0, +\infty[c+1]$ définie par les équations suivantes :

$$\Sigma = \{M = (R^l, R^v) \in]0, \infty[^{c+1} \times]0, \infty[^{c+1}, \text{tel que} :$$

 $DS^l(R^l) = DS^v(R^v), v^l(R^l) = \overline{v}^l \text{ et } v^v(R^v) = \overline{v}^v.\}$

Notons que les équations définissant Σ sont indépendantes, c'est à dire que le jacobien de dimension $(c + 3) \times 2(c + 1)$,

$$\begin{pmatrix} D^2S^l & -D^2S^v \\ Dv^l & 0 \\ 0 & Dv^v \end{pmatrix}$$

est de rang plein, c + 3. Cela découle directement des relations de Gibbs-Duhem (A.4) et de l'hypothèse **TS**.

L'espace tangent à $M \in \Sigma$, $T\Sigma_M$, peut être identifié comme le sous-espace des vecteurs $(\alpha^l, \alpha^v) \in \mathbb{R}^{c+1} \times \mathbb{R}^{c+1}$ tels que

$$D^2S^l \cdot \alpha^l = D^2S^v \cdot \alpha^v$$
, $Dv^l \cdot \alpha^l = 0$ et $Dv^v \cdot \alpha^v = 0$,

où les opérateurs D^2S^l , D^2S^v , Dv^l et Dv^v sont évalués au point M

Pour chaque $M \in \Sigma$, nous considérons la forme quadratique

$$Q_M : T\Sigma_M \longrightarrow I\!\!R$$

 $(\alpha^l, \alpha^v) \longrightarrow Q_M(\alpha^l, \alpha^v) = -{}^t\alpha^l \cdot D^2S^l \cdot \alpha^l - {}^t\alpha^v \cdot D^2S^v \cdot \alpha^v$
(A.8)

où ^t représente la transposition et où D^2S^l et D^2S^v sont les matrices hessiennes de S^l et S^v évaluées au point $M = (R^l, R^v)$.

Lemme 10 Pour tout $M \in \Sigma$, Q_M définit une structure euclidienne sur $T\Sigma_M$. Autrement dit, (Σ , Q) est une variété riemannienne.

Preuve Clairement, Q_M est non-négative (hypothèse **TS**). Il reste à prouver que Q_M est non-dégénérée. Considérons $(a', a^*) \in T\Sigma_M$ tels que $Q_M(a', a^*) = 0$. Alors, $`a' \cdot D^2S' \cdot a' = 0$ et $`a^v \cdot D^2S' \cdot a^v = 0$. L'hypothèse **TS** implique que a' est proportionnel à R' et a^* à R^v Mais $D^i \cdot a' = 0$ et $Dv' \cdot R' = \overline{a'} > 0$. Donc a' = 0. Similairement, a'' = 0.

A.4.2 La dynamique dérive d'un potentiel

Production d'entropie

La retenue d'entropie, S, est donnée par

$$S = S^{l}(R^{l}) + S^{v}(R^{v}).$$

Les résultats que Prigogine et Glansdorff [51, 90] ont obtenu pour les systèmes dissipatifs peuvent s'appliquer directement ici : la production d'entropie,

$$W = \frac{dS}{dt} - (S^{f} - S^{l} - S^{v}),$$

est non négative (S^{f} est le flux entropique de l'alimentation, $S^{l} = S^{l}(L)$ (resp. $S^{v} = S^{v}(V)$) est le flux entropique liquide (resp. vapeur) sortant).

Comme c'est la cas dans la thèse de Pierre Rouchon [98], cela peut se montrer directement sur le modèle (A.5). Nous avons

$$\frac{dS}{dt} = DS^l \cdot \frac{dR^l}{dt} + DS^v \cdot \frac{dR^v}{dt}$$

Comme $DS^{l} = DS^{v}$ et $\frac{d(R^{l} + R^{v})}{dt} = F - L - V$, nous obtenons

$$\frac{dS}{dt} = DS^{l} \cdot F - DS^{l} \cdot L - DS^{v} V$$

Mais, par homogénéité, $S^{l} = DS^{l} \cdot L$ et $S^{v} = DS^{v} \cdot V$ Donc

F

$$W = DS^{l} \cdot F - S^{f}$$
(A.9)

Considérons maintenant les flux F^{l} et F^{v} associés aux flux de liquide et de vapeur correspondant au point stationnaire. Ils sont solution du problème d'optimisation :

$$\max_{\substack{F^l, F^v\\ N^l + F^v = F}} (S^l(F^l) + S^v(F^v))$$

En remplaçant F par $F^{l} + F^{v}$ et en utilisant l'homogénéité de S^{l} et S^{v} , nous obtenons

$$W = (DS^{l}(L) - DS^{l}(F^{l})) \cdot F^{l} + (DS^{v}(V) - DS^{v}(F^{v})) \cdot F^{v} + S^{l}(F^{l}) + S^{v}(F^{v}) - S^{j}$$

Pour poursuivre, nous avons besoin du résultat suivant : Si ϕ est une fonction réelle concave et homogène de degré l dépendant de $x \in [0, \infty]^n$ et telle que le rang de $\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2}$ égale n-1, alors, quelquesoit $a \in [0, +\infty[$, on a $\min_{x \in [0, +\infty]^n} \left(\left[\frac{\partial \phi}{\partial x} \right]_x - \phi(x) \right) = 0$.

L'hypothèse TS et le résultat ci-dessus donnent

$$(DS^{l}(L) - DS^{l}(F^{l})) \cdot F^{l} \ge 0$$
 et $(DS^{v}(V) - DS^{v}(F^{v})) \cdot F^{v} \ge 0$.

Les définitions de F^{l} et F^{v} impliquent que

$$S^{l}(F^{l}) + S^{v}(F^{v}) - S^{f} \ge 0.$$

Ceci prouve que la production d'entropie W, donnée par (A.9), est toujours non-négative. De surcroît, elle est minimale à l'équilibre.

A l'exception du terme constant $S^i(F^i)+S^v(F^v)-\mathcal{S}^f,$ la production d'entropie est dans la forme standard

$$W = \sum_{\alpha} J_{\alpha}X_{\alpha},$$

introduite par Prigogine et Glansdorff [51, 90] et où les termes J_{α} sont les flux associés aux forces thermodynamiques généralisée X_{α} . Ici, les termes de flux sont $F' \in t$ les forces thermodynamiques généralisées sont $DS^2(L) - DS^2(F) - DS^2(F^2)$.

Le critère universel d'évolution de Glansdorff et Prigogine [51] stipule que l'évolution de tout système macroscopique dissipatif dont la production d'entropie est donnée par $\sum_{\alpha} J_{\alpha} X_{\alpha}$ satisfait à

$$\sum_{\alpha} J_{\alpha} \frac{dX_{\alpha}}{dt} \leq 0$$

Nous en déduisons directement la stabilité du flash quand la charge F reste constante. Comme les termes de flux F^I et F^v sont constants, $\frac{dW}{dt} \leq 0$. De plus, il est aisé de montrer que $\frac{dW}{dt} = 0$ si et seulement si $\frac{dR}{dt} = 0$. Autrement dit, W est une fonction de Lyapunov et la stabilité est assurée. Mais cette analyse peut être enrichie en montrant que la dynamique dérive d'un potentiel, ce qui constitue une propriété plus forte que l'existence d'une fonction de Lyapunov.

Le système gradient

Théorème 4 Le système dynamique décrit par (A.5) dérive du potentiel (la production d'entropie)

$$W = DS^{l} \cdot F - S^{l}$$

sur la variété riemannienne (Σ, Q) :

$$\frac{dM}{dt} = -\nabla W$$

où ∇ représente l'opérateur gradient associé à la métrique Q et $M = (R^l, R^v)$ est le point courant sur Σ .

Ce résultat implique que :

si la charge F reste constante, le potentiel W satisfait

$$\frac{dW}{dt} = -Q_M(\nabla W) \le 0.$$

Il est (localement) minimal à chaque point stationnaire. Donc, chaque point stationnaire est localement asymptotiquement stable. - autour de chaque point stationnaire, toutes les valeurs propres sont réclies et négatives : Comme dans les coordonnées locales sur Σ, le jacobien est de la forme -AB, où A et B sont des matrices représentant des formes quadratiques définies positives (A est l'Inverse de la matrice de la métrique et B est la matrice hessienne du potentiel W), ce jacobien est diagonalisable à valeurs propres réclies négatives : ceci découle d'un résultat classique sur les faisceaux réguliers de matrices.

Preuve Nous devons prouver que les coordonnées du gradient de W dans l'espace vectoriel $\mathbb{R}^{n+1} \times \mathbb{R}^{n+1}$ sont données par le membre de droite dans l'égalité (A.6). Autrement dit, étant donnée la définition du gradient, si nous trouvons $(g^{\dagger}, g^{*}) \in T\Sigma_{M}$ satisfaisant, pour tout $(a^{\dagger}, a^{*}) \in T\Sigma_{M}$,

$$-{}^{t}\alpha^{l} \cdot D^{2}S^{l} \cdot g^{l} - {}^{t}\alpha^{v} \cdot D^{2}S^{v} \cdot g^{v} = -DW \quad (\alpha^{l}, \alpha^{v})$$

= $-{}^{t}\alpha^{t} \cdot D^{2}S^{l} \cdot F = -{}^{t}\alpha^{v} \cdot D^{2}S^{v} \cdot F,$ (A.10)

alors, nécessairement (g^{l}, g^{v}) sont les composantes de ∇W dans l'espace vectoriel $\mathbb{R}^{c+1} \times \mathbb{R}^{c+1}$ contenant $T\Sigma_{M}$.

D'après le lemme 9, établissons

et montrons que g^l et g^v appartiennent à $T\Sigma_M$. Nous avons

$$D^2S^l \cdot g^l = D^2S^v \cdot g^v$$

En effet,

$$\begin{array}{rcl} D^2S^i & \left[D^2S^i + D^2S^i\right]^{-1} & D^2S^i \\ & +D^2S^i & \left[D^2S^i + D^2S^i\right]^{-1} & D^2S^i \\ & +D^2S^i & \left[D^2S^i + D^2S^i\right]^{-1} & D^2S^i \\ & -D^2S^i & \left[D^2S^i + D^2S^i\right]^{-1} & D^2S^i \\ & = D^2S^i - D^2S^i & \left[D^2S^i + D^2S^i\right]^{-1} & D^2S^i \\ & +D^2S^i & \left[D^2S^i + D^2S^i\right]^{-1} & D^2S^i \\ & +D^2S^i & \left[D^2S^i + D^2S^i\right]^{-1} & D^2S^i \\ & -D^2S^i & \left[D^2S^i + D^2S^i\right]^{-1} & D^2S^i \\ & = D^2S^i & \left[D^2S^i + D^2S^i\right]^{-1} & D^2S^i \\ & = D^2S^i & \left[D^2S^i + D^2S^i\right]^{-1} & D^2S^i \\ & = D^2S^i & \left[D^2S^i + D^2S^i\right]^{-1} & D^2S^i \\ & \end{array}$$

soit

$$D^{2}S^{l} [D^{2}S^{l} + D^{2}S^{v}]^{-1} D^{2}S^{v} = D^{2}S^{v} [D^{2}S^{l} + D^{2}S^{v}]^{-1} D^{2}S^{v}$$

Les relations (A.7) avec les relations de Gibbs-Duhem D^2S^l $R^l=0$ et D^2S^v $R^v=0$ impliquent que

$$Dv^l \cdot g^l = 0$$
 et $Dv^v \cdot g^v = 0$.

Par conséquent, $(g^l, g^v) \in T\Sigma_M$.

Prenons maintenant $(\alpha^l, \alpha^v) \in T\Sigma_M$. Rappelons qu'alors $D^2S^l \cdot \alpha^l = D^2S^v \cdot \alpha^v$ Nous avons

$${}^{-1}\alpha^{l} \cdot D^{2}S^{l} \cdot g^{l} - {}^{t}\alpha^{v} \cdot D^{2}S^{v} \cdot g^{v} = -{}^{-1}\alpha^{l} \cdot D^{2}S^{l} [D^{2}S^{l} + D^{2}S^{v}]^{-1} D^{2}S^{v} \cdot F$$

 $= -{}^{t}\alpha^{l} \cdot D^{2}S^{v} [D^{2}S^{l} + D^{2}S^{v}]^{-1} D^{2}S^{l} \cdot F$
 $= -{}^{t}\alpha^{v} \cdot D^{2}S^{v} \cdot F$
 $= -{}^{t}\alpha^{v} \cdot D^{2}S^{v} \cdot F$

Alors (g^i, g^v) , qui satisfont (A.10) pour tout vecteur tangent (α^i, α^v) , sont les composantes de ∇W dans $\mathbb{R}^{c+1} \times \mathbb{R}^{c+1}$

A.5 Conclusion

L'analyse ci-dessus peut être faite pour un flash isotherme. La fonction entropie S doit alors être remplacée par la fonction énergie de Gibbs G. Par ailleurs, l'introduction de plus de deux phases ne requiert pas de modifications substantielles.

Le problème est beaucoup plus complexe quand on considère plusieurs étages. Ceci est dû au fait que, à l'inverse du flash, la production d'entropie n'est plus minimale au point stationnaire et par suite n'est plus candidate comme fonction de Lyapunov.

Quelques résultats mathématiques

Identités d'Euler pour les fonctions homogènes de degré un L'entropie S est une fonction homogène de degré un, par rapport aux variables extensives $H \neq N$. Ses dérivées successives obéissent aux identités d'Euler. Soit f une fonction de $x \in \mathbb{R}^n$, homogène de degré un, c'est à dire que $|(\lambda x) = |\lambda| f(x)$. Alors, les dérivées premières et secondes de f vérifient :

$$Df(x).x = f(x),$$

 $D^2f(x).(x,.) = 0, |\lambda|D^2f(\lambda x) = D^2f(x).$
 $D^2f(x).(x,.) = 0, |\lambda|D^2f(\lambda x) = D^2f(x).$

Variétés riemanniennes et systèmes gradients On trouver aue présentation détaillée de la géomtrie riemannienne dans le livre de Boothy [5]. Une introduction élémentaire aux systèmes gradients est disponible dans le livre de Hirsch et Smale [58], page 199. Nous rappelons ici la définition des objets utilisés dans cette annexe. Soit Σ une variété de dimension n. Notons M le point courant un Σ et $T \Sigma_M$, de dimension n, l'espace tangent à Σ en M. Une métrique riemannienne Q est caractérisée par une application $\Sigma \ni M \to Q_M$, où Q_M est une forme quadratique définie positive sur $T \Sigma_M$. Géométriquement, $\sqrt{Q_M(a)}$ est la longueur du vecteur $\in T \Sigma_M$. Q_M définit sur $T \Sigma_M$ un unique produit scalaire noté $< -N_M$, I eque $< u, u \ge M = Q_M(u)$ pour tout $z \in T \Sigma_M$.

Le gradient de la fonction réelle W sur Σ est l'unique champ de vecteurs

$$\Sigma \ni M \rightarrow \nabla W(M) \in T\Sigma_M$$

satisfaisant

A

$$u \in T\Sigma_M$$
, $\langle \nabla W(M), u \rangle_M = L_u W(M)$,

où L_2W est la dérivée de Lie de W par rapport à u. L_2W correspond à la première variation de W dans la direction tangente u en M. A chaque champ de vecteurs $X \rightarrow X(M)$ correspond un système differentiel dM/dt = X(M). Ce système est appélé système gradient si, et seiement si, le champ de vecteurs X égale l'opposé du gradient d'une fonction réelle W : $X = -\nabla W$ W est alors appélé le potentiel du système.

Annexe B

Forme du jacobien des fonctions d'équilibre

Nous nous intéressons ici, à pression P fixée, aux propriétés du jacobien en x de la fonction d'équilibre y = k(x, P), où x (respectivement y) désigne le vecteur des fractions molaires dans le liquide (respectivement dans la vapeur). x et y sont de dimension c - 1 si c composés sont impliqués dans le mélange. Cette fonction a été définie lors de la présentation du modèle (L,V) de colonne, sans noter explicitement sa dépendance en la presentation, celle-ci étant considérée comme constante.

Le résultat connu sous le nom de troisième loi de Konovalov [79] permet d'affirmer qu'en dehors de la région critique, le jacobien $(\partial k/\partial x)$ est un scalaire strictement positif pour les mélanges binaires. Le but de cette annexe est de démontrer une extension de cette loi valable dans le cas multicomposé.

Proposition 1 Si les enthalpies molaires partielles de vaporisation sont égales pour tous les composés, alors, en dehors de la région critique, la matrica jacobienne $(\partial k/\partial x)$ est diagonalisable. Ses valeurs propres sont toutes distinctes et strictement positives.

L'hypothèse d'égalité des enthalpies molaires partielles de vaporisation est utilisée aussi pour écrire le modèle (L,V) de la dynamique d'une colonne à distiller. Grâce à cette proposition, nous disposons d'une propriété intéressante pour l'étude de tels modèles.

Preuve :

Soit le système fermé représentant un mélange de c composés pour lequel coexistent à l'équilibre thermodynamique une phase liquide et une phase vapeur. La pression du système est supposée constante.

Introduisons les notations suivantes :

les exposants l et v rapportent respectivement aux phases liquide et vapeur;

- Nⁱ_p désigne le nombre de moles du composé i (i = 1,...,c) dans la phase p (l ou v). N^p désigne le vecteur (Np,s)i=1,...,c;
- μ^{p,i} désigne le potentiel chimique associé au composé i dans la phase p (l ou v). μ^p désigne le vecteur $(u^{p,s})^{i=1,\dots,c}$
- le produit scalaire usuel des vecteurs v₁ et v₂ est noté < v₁, v₂ >;

l'exposant T représente la transposition.

En définissant $\mu^{p,i}$ comme la dérivée partielle de l'enthalpie libre de la phase p par rapport à N^{p,i}, nous avons à l'équilibre thermodynamique :

$$\mu^{l}(T, N^{l}) = \mu^{v}(T, N^{v}),$$

où la dépendance en la pression, constante, n'est pas rappelée. Les déplacements sur la variété d'équilibre (déplacements quasi-statiques) à pression constante sont tels que

$$D\mu^{l}(T, N^{l}) = D\mu^{v}(T, N^{v}),$$

soit

$$\left(\frac{\partial \mu^{l}}{\partial T} - \frac{\partial \mu^{v}}{\partial T}\right) dT + \frac{\partial \mu^{l}}{\partial N^{l}} dN^{l} = \frac{\partial \mu^{v}}{\partial N^{v}} dN^{v}$$
 (B.1)

Remarquons que :

• $\left(\frac{\partial \mu^{l}}{\partial T} - \frac{\partial \mu^{v}}{\partial T}\right)$, que nous noterons $\Lambda = (\Lambda^{i})^{i=1,\dots,c}$, égale $\frac{1}{T}$ multiplié par le vecteur des enthalpies molaires partielles de vaporisation (différence entre les enthalpies molaires par-

tielles des composés dans les phases vapeur et liquide). En effet, en désignant respectivement l'entropie, l'enthalpie et l'enthalpie libre de la phase p par S^{p} , H^{p} et G^{p} ,

$$\begin{split} &\frac{\partial \mu^{ps}}{\partial T} = \left(\frac{\partial \mu^{ps}}{\partial T}\right)_{P,P} = \\ &\left(\frac{\partial}{\partial T}\frac{\partial G^{p}}{\partial N^{s,i}}\right)_{P} = \left(-\frac{\partial S^{p}}{\partial N^{s,i}}\right)_{T,P} = -\frac{1}{T}\left(\frac{\partial TS^{p}}{\partial N^{p,i}}\right)_{T,P} = \\ &-\frac{1}{T}\left(\frac{\partial (H^{p}-G^{p})}{\partial N^{s,i}}\right)_{T,P} = -\frac{1}{T}(h^{p,i}-\mu^{p,i}), \end{split}$$

où h^{p,1} est l'enthalpie molaire partielle du composé i dans la phase p. Les éléments de ce vecteur sont tous positifs en dehors de la région critique.

• $\frac{\partial \mu^p}{\partial N^p}$ est la dérivée seconde de l'enthalpie libre de la phase p par rapport à N^p . Or les $\frac{\partial N}{\partial n}$ cathalpies libres sont convexes et homogènes de degré 1 par rapport aux variables extensives N^p . Les $\mu^{p,i}$ sont donc homogènes de degré 0. Les $\frac{\partial \mu^p}{\partial N^p}$ sont des formes quadratiques définies non négatives. Leurs matrices associées permettent de définir des applications

linéaires dont le noyau, de dimension 1, est l'ensemble des vecteurs colinéaires à N^p . Ceci s'exprime par la relation de Gibbs-Duhem (ou Euler) :

$$(N^p)^T \frac{\partial \mu^p}{\partial N^p} = 0, \qquad \frac{\partial \mu^p}{\partial N^p} N^p = 0.$$

En multipliant (B.1) à gauche par $(N^l)^T$, nous tirons

$$dT = \frac{1}{\langle N^l, \Lambda \rangle} (N^l)^T \frac{\partial \mu^v}{\partial N^v} dN^v,$$

 \mathbf{et}

$$\frac{\partial \mu^{l}}{\partial N^{l}} dN^{l} = \frac{\partial \mu^{v}}{\partial N^{v}} dN^{v} - \frac{1}{\langle N^{l}, \Lambda \rangle} \Lambda (N^{l})^{T} \frac{\partial \mu^{v}}{\partial N^{v}} dN^{v},$$
 (B.2)

Soit \bar{N}^p la somme des éléments de N^p et les fractions molaires

$$x^{i} = \frac{N^{l,i}}{\bar{N}^{l}}, \quad y^{i} = \frac{N^{v,i}}{\bar{N}^{v}}.$$

En notant $X = (x_i)^{i=1,\dots,c}$ et $Y = (y_i)^{i=1,\dots,c}$, et en utilisant la relation de Gibbs-Duhem, (B.2) devient

$$\bar{N}^{l} \frac{\partial \mu^{L}}{\partial N^{L}} dX = \bar{N}^{v} \frac{\partial \mu^{V}}{\partial N^{v}} dY - \frac{\bar{N}^{v}}{\langle N^{L}, \Lambda \rangle} \Lambda (N^{L})^{T} \frac{\partial \mu^{V}}{\partial N^{v}} dY$$
 (B.3)

Mais, par définition,

$$\sum_{i=1}^{c} dx_{i} = 0, \qquad \sum_{i=1}^{c} dy_{i} = 0.$$

Choisissons les coordonnées indépendantes $x = (x^i)^{i=1,\dots,c-1}$ et $y = (y^i)^{i=1,\dots,c-1}$ Nous avons dX = Pdx et dY = Pdy, où P est la matrice rectangulaire $c \times (c-1)$

$$\begin{pmatrix} I_{c-1} \\ -1 \cdots -1 \end{pmatrix}$$

et I_{c-1} la matrice identité de dimension c - 1. Sous l'hypothèse que les enthalpies molaires partielles de vaporisation sont égales pour tous les composés, (B.3) s'écrit

$$P^{T} \frac{\partial \mu^{l}}{\partial N^{l}} P dx = \frac{\bar{N}^{v}}{\bar{N}^{l}} P^{T} \frac{\partial \mu^{v}}{\partial N^{v}} P dy.$$

Montrons que $P^{T} \frac{\partial \mu^{p}}{\partial N^{p}} P$ est une forme quadratique définie positive. Cette matrice $(c-1) \times (c-1)$ est clairement symétrique. De plus, si $v = (v^{i})^{i=1,\dots,c-1}$

$$v^T P^T \frac{\partial \mu^p}{\partial N^p} P v = w^T \frac{\partial \mu^p}{\partial N^p} w,$$

avec $w=(v^1,\ldots,v^{c-1},-v^1\cdots-v^{c-1})^T,$ donc n'appartenant pas au noyau de la forme définie non négative $\frac{\partial\mu^p}{\partial N^p}$

L'assertion est démontrée car les valeurs propres de la matrice jacobienne de y = k(x) sont celles du faisceau $P^{T} \frac{\partial \mu^{V}}{\partial N^{V}} P + \lambda P^{T} \frac{\partial \mu^{L}}{\partial N^{L}} P$, où les deux matrices sont définies positives [36, 37].

Annexe C

Remarque sur l'observateur de Deza-Gauthier

Dans sa thèse (voir [22] et les références incluses), F. Deza propose une nouvelle méthode permettant la construction d'observateurs pour une classe de systèmes non-lindaires. Sans remettre en cause son intérêt, nous discutons brièvement ici son applicabilité aux colonnes à distiller. Dans ce cadre, il pourrait intervenir dans une commande par retour d'état sur le modèle complet.

Considérons le modèle (L,V) d'une colonne binaire de quatre plateaux, à condenseur total et alimentée au plateau 3 par un mélange au point de bulle. Pour les plateaux, les rétentions molaires dans la vapeur sont négligées et les rétentions molaires dans le liquide sont toutes prises égales à 1. En notant :

 x_i la composition liquide au plateau i;

- k(x_i) la composition vapeur au plateau i;
- z la composition de la charge;
- L, V et F respectivement les débits molaires de liquide, de vapeur et d'alimentation,

ce modèle s'écrit :

$$\begin{cases}
\frac{dx_1}{dt} = V(k(x_2) - x_1) \\
\frac{dx_2}{dt} = V(k(x_3) - k(x_2)) + L(x_1 - x_2) \\
\frac{dx_3}{dt} = V(k(x_4) - k(x_3)) + L(x_2 - x_3) + F(z - x_3) \\
\frac{dx_2}{dt} = V(x_4 - k(x_4)) + (L + F)(x_3 - x_4)
\end{cases}$$
(C.1)

En reprenant les notations de Deza (voir [23]), le système (C.1) se réécrit, pour une sortie $y = x_1$

$$\begin{cases} \frac{dx}{dt} = Vg_1(x) + g(x, F, L, z) \\ y = h(x) = x_1, \\ g_1(x) = \begin{pmatrix} k(x_2) - x_1 \\ k(x_3) - k(x_2) \\ k(x_4) - k(x_3) \\ x_4 - k(x_4) \end{pmatrix} \end{cases}$$

avec

Deza montre que, sous certaines conditions, l'état x du système précédent est observable. Il sait alors construire un observateur pour lequel l'erreur d'observation converge asymptotiquement vers zéro mais doit pour cela utiliser le changement de variable suivant :

$$z = \varphi(x) = \begin{pmatrix} h(x) \\ L_{g_1}h(x) \\ L_{g_1}^2h(x) \\ L_{g_1}^3h(x) \end{pmatrix}$$

Ce changement de variable s'écrit :

$$\begin{pmatrix} z_1 \\ z_2 \\ z_3 \\ z_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x_1 \\ -(k(x_2) - x_1 + \frac{\partial k}{\partial x_1}(k(x_3) - k(x_2)) \\ k(x_2) - x_1 - (\frac{\partial k}{\partial x_2} + \frac{\partial^2 k}{\partial x_2^2}(k(x_3) - k(x_2)) \\ +(\frac{\partial k}{\partial x_2} \frac{\partial k}{\partial x_2})(k(x_4) - k(x_3)) \end{pmatrix}$$

En pratique, il est nécessaire de calculer le jacobien de φ . Ici, des dérivées de k(z) jusqu'à l'ordre 2 interviennent. Dans le cas d'une colonne à n plateaux, des dérivées jusqu'à l'ordre n - 2interviendraient. C'est cet aspect qui pose problème. En effet, les moèlées thermodynamiques d'où est issue la fonction k sont généralement ajustés, à l'ordre zéro, à partir d'expériences. Il n'est donc pas réaliste numériquement d'apporter un crédit important aux dérivées n-ièmes de k(x). Pour cette raison, nous doutons de la pertinence de cette méthode pour les colonnes à distiller, méme s'il est possible d'obtenir, voir [23], des résultats concluants lorsque les moèleles de colonne simulé et utilisé pour l'observation sont identiques ou très proches l'un de l'autre et qu'il est possible en outre d'obtenir explicitement l'expression des dérivées de la fonction d'équilibre k.

Annexe D

Résultats de la littérature

D.1 Approximation des systèmes

Nous présentons dans cette section

le théorème de Tikhonov, pour l'approximation des systèmes singulièrement perturbés;

 le théorème de la variété centre, qui permet aussi d'aborder l'approximation des systèmes singulièrement perturbés.

D.1.1 Théorème de Tikhonov

Soit le système

$$\begin{cases}
\frac{dx}{dt} = f(x, z, u(t), \varepsilon) \\
\varepsilon \frac{dx}{dt} = g(x, z, u(t), \varepsilon)
\end{cases}$$
(D.1)

où ε est un petit réel positif, x l'état lent et z l'état rapide du système, u les entrées. f et gsont des fonctions régulières. Soit $(x(t, \varepsilon), z(t, \varepsilon))$ la solution de ce système sur l'intervalle [0, T]correspondant à la solution initiale $x(0, \varepsilon) = x^0$ et $z(0, \varepsilon) = z^0$ On peut associer à (D.1) le sous-système lent

$$\begin{cases}
\frac{dx}{dt} = f(x, z, u(t), 0) \\
0 = g(x, z, u(t), 0).
\end{cases}$$
(D.2)

Supposons que ce système admette sur l'intervalle [0, T] une solution $(x_0(t), z_0(t))$ de condition initiale $x_0(0) = x^0$ Pour \bar{t} dans [0, T], le sous-système rapide (en $\tau = t/\varepsilon$) est

$$\frac{dz}{d\tau} = g(x_0(\bar{t}), z(\tau), u(\bar{t}), 0).$$

Théorème 5 Si, pour tout $\bar{t} \in [0, T]$, la matrice associée à

$$\frac{\partial g}{\partial z}(x_0(\bar{t}), z_0(\tau), u(\bar{t}), 0)$$

est à valeurs propres à parties réelles négatives, et si de plus z⁰ appartient au bassin d'attraction de

$$\frac{dz}{d\tau} = g(x^0, z(\tau), u(0), 0),$$

alors

$$\left\{ \begin{array}{ll} \lim_{\varepsilon \to 0^+} x(t,\varepsilon) &=& x_0(t) \\ \lim_{\varepsilon \to 0^+} z(t,\varepsilon) &=& z_0(t) \end{array} \right.$$

uniformément sur tout intervalle fermé de [0, T].

Pour la preuve, voir [127].

D.1.2 Théorème de la variété centre

Soit le système

$$\begin{cases}
\frac{dx}{dt} = Ax + f(x, y) \\
\frac{dy}{dt} = By + g(x, y)
\end{cases}$$
(D.3)

admettant (0,0) pour point stationnaire. Nous avons donc f(0, 0) = 0 et g(0, 0) = 0. Nous supposons de plus que les dérivées partielles de f et g sont nulles au point stationnaire, que toutes les valeurs propres de A sont à partie réelle nulle et celles de B à partie réelle négative.

Théorème 6 Si l'équation g(z, y) admet une unique solution y = h(x), alors il existe, pour y suffisament proche de 0 et dans un voisinage du point stationnaire, une variété invariante définie par y = h(x). Sur cette variété appelée variété centre, la dynamique s'écrit

$$\frac{du}{dt} = Au + f(u, h(u)),$$

u(t) valant x(t) plus un terme décroissant exponentiellement vers 0. De plus, si cette dynamique est localement stable en u = 0, alors le point stationnaire de (D.3) est stable.

Ainsi, dans un voisinage du point stationnaire, il est possible d'approximer la dynamique du système (D.3) par la dynamique sur sa variété centre. Le cas des systèmes singulièrement perturbés peut être vu comme un cas particulier d'application du théorème de la variété centre. Il suffit d'inclure l'équation dc/dt = 0 dans la définition du système et de développer les champs de vecteurs définissant ce dernier autour $de \varepsilon = 0$. Pour de tels développements, voir le livre de Carr [9] et les références qui s'y trouvent.

.

D.2 Le théorème de Rosenbrock

A la suite de travaux sur la distillation [95], Rosenbrock démontre un théorème [96] permettant la construction d'une fonction de Lyapunov pour une classe de systèmes, incluant la distillation dans le cas binaire [97] mais aussi certains réacteurs [99], L'objet de cette section est de rappeler l'énoncé de ce théorème, utilisé à plusieurs reprises dans ce mémoire.

Théorème 7 [Rosenbrock] Soit le système

$$\frac{dx}{dt} = f(x),$$
 (D.4)

où l'état x est de dimension p $(x = (x^i)^{i=1,...,p})$. Supposons que

- x ∈ Ω, où Ω est un convexe fermé borné de ℝ^p;
- f = (f¹)^{i=1,...,p} est continûment dérivable sur Ω;
- pour toute condition initiale dans Ω, la solution reste dans Ω;
- 4. tous les éléments hors diagonaux de l'approximation tangente de f sont positifs ou nuls,
- pour chaque colonne de l'approximation tangente de f, l'opposé de la somme des éléments est positif ou nul;
- 6. St. pour une colonne i, le réél défini au point précédent est nul, alors il existe une colonne j différente de i telle que ∂P /∂x + soit non nul. Si la somme des éléments de la colonne est nulle, alors il existe une colonne k différente des colonnes i et j pour laquelle ∂P /∂x² est non nul. Si la somme des éléments de la colonne k est nulle, alors il existe une colonne k...Ce processus conduit à une colonne l dont la somme des éléments est non nulle.

Alors, le système (D.4) admet un unique point stationnaire dans Ω , globalement asymptotiquement stable dans Ω . La fonction $\sum_{i=1}^{p} |f^{i}(x)|$ est une fonction de Lyapunov du système (D.4).

Bibliographie

- M. Agarwal and D.E. Seborg. A Multivariable Nonlinear Self-Tuning Controller. AIChE Journal, 33:1376–1386, 1987
- [2] C. Albaret. Contribution à l'Étude et à la Commande des Colonnes de Distillation Multiconstituants. Thèse. Ecole Nationale Supérieure des Mines de Paris, 1992.
- [3] V. Arnold. Equations Différentielles Ordinaires. Mir, Moscou, 1974.
- [4] A. Benallou, D.E. Seborg, and D.A. Mellichamp. Dynamic Compartmental Models for Separation Processes AIChE Journal, 32:1067–1078, 1986.
- [5] W.M. Boothby. An Introduction to Differentiable Manifolds and Riemannian Geometry. Academic Press, 1975.
- [6] A. Brambilla and L. D'Elia. Multivariable Controller for Distillation Columns in the Presence of Strong Directionality and Model Errors. *Industrial and Engineering Chemistry Research*, 31:536–543, 1992.
- [7] E.H. Bristol. On a New Measure of Interaction for Multivariable Process Control. IEEE Transactions on Automatic Control, 11:133–134, 1966.
- [8] E. Canon. Etude Mathématique de Deux Modèles de Colonnes à Distiller. Thèse. Université Jean Monnet de Saint-Etienne, 1990.
- [9] J Carr. Applications of Center Manifold Theory. Springer, Berlin, 1981.
- [10] T.S. Chang and D.E. Seborg. A linear programming approach for multivariable feedback control with inequality constraints. *International Journal of Control*, 37(3):583–597, 1983.
- [11] T. Chiang and W.L. Luyben. Incentives for Dual Composition Control in Single and Heat-Integrated Binary Distillation Control. Industrial and Engineering Chemistry Fundamentals, 24:352-359, 1985.
- [12] I.L. Chien, D.C. Mellichamp, and D.E. Seborg. Multivariable Self-Tuning Control Strategy for Distillation Columns Industrial and Engineering Chemistry Process Design and Development, 25:595-600, 1986.
- [13] D.W. Clarke, C. Mohtadi, and P.S. Tuffs. Generalized Predictive Control-Part I. The Basic Algorithm. Automatica, 23(2):137-148, 1987

- [14] D.W. Clarke, C. Mohtadi, and P.S. Tuffs. Generalized Predictive Control-Part II. Extensions and Interpretations. Automatica, 23(2):149–160, 1987
- [15] Y. Creff, J. Lévine, and P. Rouchon. Mtns'93. 1992.
- [16] J.C. Culioli and P. Carpentier. I. Optimisation Libre en dimension finie. Cours à l'Ecole Nationale Supérieure des Mines de Paris, 1990.
- [17] J.C. Culioli and P. Carpentier. II. Optimisation sous Contraintes en dimension finie. Cours à l'Ecole Nationale Supérieure des Mines de Paris, 1990.
- [18] J.C. Culioli and P. Carpentier. III. Optimisation Dynamique. Cours à l'Ecole Nationale Supérieure des Mines de Paris, 1990.
- [19] C.R. Cutler and B.L. Ramaker. Dynamic Matrix Control- A Computer Control Algorithm. In Proceedings of the JACC, S.F., CA., 1980.
- [20] S.R. Dartt. A Survey of Process Control Application Needs. Chemical Engineering Progress, 11, December 1985.
- [21] E.J. Davison. The Interaction of Control Systems in a Binary Distillation Column. Automatica, 6:447-461, 1970.
- [22] F. Deza. Contribution à la Synthèse d'Observateurs Exponentiels. Application à un Procédé Industriel : les Colonnes à Distiller. Thèse. Institut National des Sciences Appliquées de Rouen, Juin 1991.
- [23] F. Deza. Exponentially Converging Observers fo Distillation Columns. In Proceedings of the First ECC Conference, Grenoble, France. Hermes, 1991.
- [24] M.F. Doherty and J.D. Perkins. On the Dynamics of Distillation Processes—IV Uniqueness and Stability of the Steady State in Homogeneous Continuous Distillations. *Chemical Engineering Science*, 37:381–392, 1977
- [25] J.C. Doyle. Analysis of Feedback Systems with Structured Uncertainties. In IEEE Proceedings, volume 129, pages 242–250., 1982.
- [26] J.C. Doyle. Structured Uncertainty in Control System Design. In Proceedings of the 24th IEEE Conf. Dec. Con., décembre 1985.
- [27] C.G. Economou, M. Morari, and B.O. Paisson. Internal Model Control. 5. Extensions to Nonlinear Systems. Industrial and Engineering Chemistry - Process Design and Development, 25:403-411, 1986.
- [28] T.F. Edgar and C.O. Schwanke. A Review of the Application of Modern Control Theory to Distillation Columns In JACC, pages 1370–1376, 1977
- [29] M. España and I.D. Landau. Reduced Order Bilinear Models for Distillation Columns. Automatica, 14:345-355, 1978.

- [30] M. Fliess, J. Lévine, and P. Rouchon. Index of a general differential-algebraic implicit system. In S. Kimura and S. Kodama, editors, *Recent Advances in Mathematical Theory* of Systems, Control, Network and Signal Processing II (MTNS-91), pages 289-294, Kobe, Japan, 1992. Mita Press.
- [31] M. Fliess, J. Lévine, and P. Rouchon. Index of an implicit time-varying differential equation: a noncommutative linear algebraic approach. *Linear Algebra and its Applications*, a paraiter, 1992.
- [32] B.A. Francis. A Course in H_∞ Control Theory. Lecture Notes in Control and Information Science. Springer, Berlin, 1987
- [33] B.A. Francis and J.C. Doyle. Linear Control Theory with an H_∞ Optimality Criterion. SIAM Journal on Control and Optimization, 25(4):815–844, 1987
- [34] C. Fuentes and W.L. Luyben. Control of High-Purity Distillation Columns. Industrial and Engineering Chemistry - Process Design and Development, 22:361–366, 1983.
- [35] S.E. Gallun and C.D. Holland. Gear's Proceedure for the Simultaneous Solution of Differential and Algebraic Equations with Application to Unsteady State Distillation Problems *Computers and Chemical Engineering*, 6:231–244, 1982.
- [36] F.R. Gantmacher. Théorie des Matrices: tome 1. Dunod, Paris, 1966.
- [37] F.R. Gantmacher. Théorie des Matrices: tome 2. Dunod, Paris, 1966.
- [38] C.E. Garcia and M. Morari. Internal Model Control. 1. A Unifying Review and Some New Results. Industrial and Engineering Chemistry - Process Design and Development, 21:308–323, 1982.
- [39] C.E. Garcia and M. Morari. Internal Model Control. 2. Design Procedure for Multivariable Systems. Industrial and Engineering Chemistry - Process Design and Development, 24:472–484, 1985.
- [40] C.E. Garcia and M. Morari. Internal Model Control. 3. Multivariable Control Law Computation and Tuning Guidelines. Industrial and Engineering Chemistry - Process Design and Development, 24:484–494, 1985.
- [41] C.E. Garcia and A.M. Morshedi. Quadratic Programming Solution of Dynamic Matrix Control (QDMC). Chemical Engineering Communications, 46:73-87, 1986.
- [42] C.E. Garcia, D.M. Prett, and M. Morari. Model Predictive Control: Theory and Practice-A Survey. Automatica, 25(3):335–348, 1989.
- [43] G. Gattu and E. Zafiriou. Nonlinear Quadratic Dynamic Matrix Control with State Estimation. Industrial and Engineering Chemistry Research, 31:1096-1104, 1992.
- [44] J.P. Gauthier, G. Bornard, S. Bacha, and M. Idir. Rejet de Perturbations pour un Modèle Non Linéaire de Colonne à Distiller In Développement et Utilisation d'Outils et Modèles Mathématiques en Automatique, Analyse des Systèmes et Traitement du Signal. CNRS Paris, 1983.

- [45] C.W Gear. Numerical Initial Value Problems in Ordinary Differential Equations. Prentice-Hall, Englewood Cliffs, 1971.
- [46] C.W. Gear. Simultaneous Numerical Solution of Differential-Algebraic Equations. IEEE Transactions on Circuit Theory, CT-18:89–95, 1971.
- [47] C.W. Gear. Differential-Algebraic Equation Index Transformations. SIAM Journal on Scientific and Statistical Computations, 9:39–47, 1988.
- [48] C.W. Gear and L.R. Petzold. ODE Methods for the Solution of Differential-Algebraic Systems. SIAM Journal on Numerical Analysis, 21:716–728, 1984.
- [49] C. Georgakis. On the Use of Extensive Variables in Process Dynamics and Control. Chemical Engineering Science, 41(6):1471-, 1986.
- [50] A. Georgiou, C. Georgakis, and W.L. Luyben. Nonlinear Dynamic Matrix Control for High-Purity Distillation Columns AIChE Journal, 34:1287-1298, 1988.
- [51] P. Glansdorff and I. Prigogine. Structure, Stabilité et Fluctuations. Masson, Paris, 1971.
- [52] P. Grosdidier and M. Morari. Interaction Measures for Systems Under Decentralized Control. Automatica, 22(3):309-319, 1986.
- [53] P. Grosdidier and M. Morari. The μ-Interaction Measure. Industrial and Engineering Chemistry Research, 26:1193-1202, 1987
- [54] P. Grosdidier, M. Morari, and B.R. Holt. Closed-Loop Properties from Steady-State Gain Information. Industrial and Engineering Chemistry - Fundamentals, 24:221–235, 1985.
- [55] K.E. Häggblom. Consistent Control Structure with Application to Distillation Control. PhD thesis, Institutionen för reglerteknik- Abo Akademi, Finland, 1988.
- [56] T Hägglund and K.J. Aström. Industrial Adaptive Controllers Based on Frequency Response Techniques. Automatica, 27(4):599-609, 1991
- [57] M.A. Henson and D.E. Seborg. A critique of differential geometric control stategies for process control. In Preprints of 11th IFAC World Congress, Tallin, (August 13-17 1990), 1990.
- [58] M.W. Hirsch and Smale S. Differential Equations, Dynamical Systems and Linear Algebra. Academic Press, 1974.
- [59] C.D. Holland. Fundamentals of Multicomponent Distillation. McGraw-Hill, New-York, 1981
- [60] A. Isidori. Nonlinear Control Systems. Communications and Control Engineering Series. Springer, Berlin, 1989.
- [61] V.I. Istrăţescu. Fixed Point Theory. Mathematics and its Applications. D. Reidel Publishing Company, 1988.

- [62] A. Jafarey and T.J. McAvoy. Degeneracy of Decoupling in Distillation Columns. Industrial and Engineering Chemistry - Process Design and Development, 17:485-490, 1978.
- [63] A. Kasinski and J. Lévine. A Fast Graph-Theoretic Algorithm for the Feedback Decoupling Problem of Nonlinear Systems. Lect. Notes in Cont. and Inf. Sciences, pages 550– 562. Springer, Berlin, 1984.
- [64] Häggblom K.E. and K.V Waller. Transformations and Consistency Relations of Distillation Control Structures. AIChE Journal, 34(10):1634-1648, 1988.
- [65] Häggblom K.E. and K.V Waller. Control Structures for Disturbance Rejection and Decoupling of Distillation. AIChE Journal, 36(7):1107–1113, 1990.
- [66] A. Kienle and W. Marquardt. Bifurcation Analysis and Steady-State Multiplicity of Multicomponent, Non-Equilibrium Distillation Processes. *Chemical Engineering Science*, 46(7):1577-1769, 1991.
- [67] H.Z. Kister. Distillation Operation. McGraw-Hill, New-York, 1990.
- [68] V.C. Klema and A.J. Laub. The Singular Value Decomposition: Its Computation and Some Applications. *IEEE Transactions on Automatic Control*, 25(2):164–176, 1980.
- [69] M. Kümmel and H. W. Andersen. Controler Adjustement for Improved Nominal Performance and Robustness – II: Robust Geometric Control of Distillation Column. Chemical Engineering Science, 42(8), 1987
- [70] M. Kümmel and L. Foldager. Geometric Control of a Distillation Column. Control and Computers, 14(1):21–25, 1986.
- [71] A.J. Laub. Numerical Linear Algebra Aspects of Control Design Computations. IEEE Transactions on Automatic Control, 30(2):97–108, 1985.
- [72] J. Lévine and P. Rouchon. Quality Control of Binary Distillation Columns via Nonlinear Aggregated Models. Automatica, 27(3):463-480, 1991.
- [73] N.G. Llyod. Degree Theory. Cambridge University Press, 1978.
- [74] A. Lucia. Uniqueness of Solutions to Single-Stage Isobaric Flash Processes Involving Homogeneous Mixtures. AIChE Journal, 32(11):1761-1770, 1986.
- [75] D.G. Luenberger. Linear and Non-Linear Programming. Addison-Wesley, 1990.
- [76] W.L. Luyben. Distillation Decoupling. AIChE Journal, 16:198-203, 1970.
- [77] W.L. Luyben. Derivation of Tranfer Functions for Highly Nonlinear Distillation Columns. Industrial and Engineering Chemistry Research, 26:2490-2495, 1987
- [78] T. Magnussen, M.L. Michelsen, and A. Fredenslund. Azeotropic Distillation Using UNI-FAC. In Int. Chem. Eng. Symp. Ser., No. 56, third Int. Symp. on distillation. ICE, Rugby, Warwickshire, England, 1979.

- [79] W. Malesinski. Azeotropy and Other Theoretical Problems of Vapour-Liquid Equilibrium. Interscience, New York, 1965.
- [80] J.M Martin-Sanchez and S.L. Shah. Multivariable Adaptive Predictive Control of a binary Distillation Column. Automatica, 20:607–620, 1984.
- [81] G. Mijares, C.D. Holland, R. McDaniel, C.R. Dollar, and S.E. Gallun. Analysis and Evaluation of the Relative Gains for Nonlinear Systems. *Computers and Chemical Engineering*, 9(1):61–70, 1985.
- [82] J. Milnor. Topology from the Differential Viewpoint. University Press of Virginia, Charlottesville, 1978.
- [83] B.C. Moore. Principal Component Analysis in Linear Systems: Controllability, Observability and Model Reduction. *IEEE Transactions on Automatic Control*, 26(1):17–31, 1981.
- [84] M. Morari. Advances in Process Control Theory. Chemical Engineering Progress, 84(10), 1988.
- [85] K.M. Moudgalya, W.L. Luyben, and C. Georgakis. A Dual-Pulse Method for Modeling Processes with Large Time Constants. *Industrial and Engineering Chemistry Research*, 26:2498-2501, 1987
- [86] T.J. Mountziaris and A. Georgiou. Design of Robust Noninteracting Controllers for High-Purity Binary Distillation Columns. Industrial and Engineering Chemistry Research, 27:1450-1460, 1988.
- [87] B.A. Ogunnaike. Dynamic Matrix Control: A Nonstochastic, Industrial Process Control Technique with Parallels in Applied Statistics. Industrial and Engineering Chemistry Fundamentals, 25:712–718, 1986.
- [88] H. Ohno. Disturbance Decoupling Control with Stability for a Binary Distillation Column. Technical report, Department of Chem. Eng., Kobe University, Japan, 1987
- [89] L. Pernebo and L.M. Silverman. Model Reduction via State Space Reresentations. IEEE Transactions on Automatic Control, 27(2):382–387, 1982.
- [90] I. Prigogine. Introduction to Thermodynamics of Irreversible Processes. Wiley-Interscience, New-York, second edition, 1961.
- [91] G.J. Prokopakis and W.D. Seider. Dynamic Simulation of Azeotropic Distillation Towers. AIChE Journal, 29(6):1017–1028, 1983.
- [92] Prosys Technology Ltd, Sheraton House, Castle Park, Cambridge CB3 0AX, U.K. Speedup User Manual: Release 5.0, March 1988.
- [93] N.L. Ricker. Use of Quadratic Programming for Constrained Internal Model Control. Industrial and Engineering Chemistry Process Design and Development, 24:925-936, 1985.

- [94] J.E. Rijnsdorp. Interaction in Two-Variable Control Systems for Distillation Columns-I. Automatica, 1:15-28, 1965.
- [95] H. H. Rosenbrock. The Control of Distillation Columns. Trans. Instn. Chem. Engrs, 40:35–53, 1962.
- [96] H.H. Rosenbrock. A Theorem of Dynamic Conservation for Distillation. Trans. Instn. Chem. Engrs, 38:279-287, 1960.
- [97] H.H. Rosenbrock. A Lyapunov Function With Applications to Some Nonlinear Physical Systems. Automatica, 1:31-53, 1962.
- [98] P. Rouchon. Simulation Dynamique et Commande Non Linéaire de Colonnes à Distiller. Thèse. Ecole Nationale Supérieure des Mines de Paris, Mars 1990.
- [99] P. Rouchon. Remarks on Some Applications of Nonlinear Control Techniques to Chemical Processes. In Nolcos'92-Proceedings., 1992.
- [100] P. Rouchon and Y. Creff. Geometry of the Flash Dynamics. submitted for publication, 1991.
- [101] J. Schwartzentruber. Notions de thermodynamique appliquée calcul des propriétés des phases homogènes et de l'équilibre entre phases. Cours à l'Ecole Nationale Supérieure des Mines de Paris, 1988.
- [102] J. Schwartzentruber. Eléments de Thermodynamique Macroscopique. Cours à l'Ecole Nationale Supérieure des Mines de Paris, 1992.
- [103] D.E. Seborg, T.F. Edgar, and S.L. Shah. Adaptive Control Strategies for Process Control: A Survey. AIChE Journal, 32(6):881–913, 1986.
- [104] K. Shimizu, B.R. Holt, M. Morari, and R.S.H. Mash. Assessment of Control Structures for Binary Distillation Columns with Secondary Reflux and Vaporization. *Industrial and Engineering Chemistry - Process Design and Development*, 24:852–858, 1985.
- [105] K. Shimizu and R.S.H. Mah. Pole Assignment in Binary SRV Distillation. Computers and Chemical Engineering, 7(2):123–127, 1983.
- [106] K. Shimizu and M. Matsubara. Decoupling and Disturbance Rejection Control of a Binary Distillation Column with Pressure Variation. *Journal of Chemical Engineering of Japan*, 17(3):262–269, 1984.
- [107] K. Shimizu and M. Matsubara. Triangular Decoupling for a Binary Distillation Column Under Pressure Control. IEEE Transactions on Automatic Control, 30(5):474-478, 1985.
- [108] F.G. Shinskey. Distillation Control. McGraw-Hill, New-York, 1984.
- [109] A.N. Shoshitaishvili. On Bifurcations of the Topological Type of Singularities of Vector Fields Depending on Parameters. (english version in) Amer. Math. Soc. Trans., 2:180-, 1982.
- [110] R.F. Sincovec, A.M. Erisman, E.L. Yip, and M.A. Epton. Analysis of Descriptor Systems Using Numerical Algorithms. *IEEE Transactions on Automatic Control*, 26:139–147, 1981.
- [111] S. Skogestad, E.W. Jacobsen, and M. Morari. Inadequacy of Steady-State Analysis for Feedback Control: Distillate Bottom Control of Distillation Columns. *Industrial and Engineering Chemistry Research*, 29:2339–2346, 1990.
- [112] S. Skogestad, P. Lundström, and E.W. Jacobsen. Selecting the Best Distillation Control Configuration. AIChE Journal, 36(15):753-764, 1990.
- [113] S. Skogestad and M. Morari. Control Configuration Selection for Distillation Columns. AIChE Journal, 33:1620–1635, 1987
- [114] S. Skogestad and M. Morari. Effect of Disturbance Directions on Closed-Loop Performance. Industrial and Engineering Chemistry Research, 26:2029-2035, 1987
- [115] S. Skogestad and M. Morari. Implications of Large RGA Elements on Control Performance. Industrial and Engineering Chemistry Research, 26:2323-2330, 1987
- [116] S. Skogestad and M. Morari. The Dominant Time Constant for Distillation Columns. Computers and Chemical Engineering, 11(6):607–617, 1987
- [117] S. Skogestad and M. Morari. LV-Control of a High-Purity Distillation Column. Chemical Engineering Science, 43(1):33–48, 1988.
- [118] S. Skogestad and M. Morari. Some New Properties of the Structured Singular Value. IEEE Transactions on Automatic Control, 33(12):1151-1154, 1988.
- [119] S. Skogestad, M. Morari, and J.C. Doyle. Robust Control of Ill-Conditioned Plants: High-Purity Distillation. *IEEE Transactions on Automatic Control*, 33:1092–1105, 1988.
- [120] G. Soave. Equilibrium Constants from a Modified Redlich-Kwong Equation of State. Chemical Engineering Science, 27:1197-1203, 1972.
- [121] G. Soave. Direct Calculation of Pure-Compound Vapour Pressures through Cubic Equations of State. Fluid Phase Equilibria, 31:203-207, 1986.
- [122] L.N. Sridhar and A. Lucia. Analysis and Algorithms for Multistage Separation Pocesses. Industrial and Engineering Chemistry Research, 28:793-803, 1989.
- [123] L.N. Sridhar and A. Lucia. Analysis of Multicomponent, Multistage Separation Pocesses: Fixed Temperature and Fixed Profiles. Industrial and Engineering Chemistry Research, 29:1668-1675, 1990.
- [124] G.T Stanley and T.J. McAvoy. Dynamic Energy Conservation Aspects of Distillation Control. Industrial and Engineering Chemistry - Fundamentals, 24:439-443, 1985.
- [125] T Takamatsu, I. Hashimoto, and Y Nakai. A Geometric Approach to Multivariable Control System Design of a Distillation Column. Automatica, 15:387–402, 1979.

- [126] T. Takamatsu and K. Kawachi. The Minimum Number of Feedback State Variables for the Decoupling Control of a Binary Distillation Column. *Journal of Chemical Engineering* of Japan, 11(3):179–184, 1978.
- [127] A. Tikhonov, A. Vasil'eva, and A. Sveshnikov. Differential Equations. Springer, Berlin, 1980.
- [128] M. Van Winkle. Distillation. McGraw-Hill, New-York, 1967
- [129] K.V. Waller. Decoupling in Distillation. AIChE Journal, 20:592-594, 1974.
- [130] K.V Waller, D.H. Finnerman, P.M. Sandelin, K.E. Häggblom, and S.E. Gustafsson. An Experimental Comparison of Four Control Structures for Two-Point Control of Distillation. Industrial and Engineering Chemistry Research, 27:624-630, 1988.
- [131] J.M. Wassick and R.L. Tummala. Multivariable Internal Model Control for a Full-Scale Industrial Distillation Column. *IEEE Control System Magazine*, pages 91–96, janvier 1989.
- [132] F. Weinhold. Metric Geometry of Equilibrium Thermodynamics: I. Journal of Chemical Physics, 63:2479–2483, 1974.
- [133] S. Widagdo, W.D. Seider, and D.H. Sebastian. Bifurcation Analysis in Heterogeneous Azeotropic Distillation. AIChE Journal, 35(9):1457–1464, 1989.
- [134] R. Woinet, G. Thomas, and J. Bordet. Adaptive Control Based on Pole Placement: An Experimental Test on a Binary Distillation Column. *Chemical Engineering Science*, 46(4):949-957, 1991
- [135] W.M. Wonham. Linear Multivariable Control: a Geometric Approach Springer, Berlin, 1974.
- [136] D.R. Yang, D.E. Seborg, and D.A. Mellichamp. Combined Balance Control Structure for Distillation Columns. *Industrial and Engineering Chemistry Research*, 30:2159–2168, 1991.
- [137] D.R. Yang, K.V Waller, D.E. Seborg, and D.A. Mellichamp. Dynamic Structural Transformations for Distillation Control Configurations. *AIChE Journal*, 36(9):1391– 1402, 1990.
- [138] B.E. Ydstie, A.H. Kemna, and L.K. Liu. Multivariable Extended-Horizon Adaptive Control. Computers and Chemical Engineering, 12(7):733-743, 1988.
- [139] C. Yu and W.L. Luyben. Use of Multiple Temperature for the Control of Multicomponent Distillation Columns. Industrial and Engineering Chemistry Process Design and Development, 23:590–597, 1984.
- [140] E. Zafiriou. Robust Model Predictive Control of Processes with Hard Constraints. Computers and Chemical Engineering, 14(4&5):359-371, 1990.

- [141] E. Zafiriou and A.L. Marchal. Stability of SISO Quadratic Dynamic Matrix Control with Hard Output Constraints. AIChE Journal, 37(10):1550-1560, 1991.
- [142] E. Zafiriou and M. Morari. Robust H₂-type IMC controller design via the structured singular value. In Proceedings of the 10th IFAC World Congress. Munich, 1987
- [143] E. Zafiriou and M. Morari. A General Controller Synthesis Methodology Based on the IMC structure and the H₂, H_∞ and μ-optimal Control Theories. Computers and Chemical Engineering, 12(7):757-765, 1988.
- [144] E. Zafiriou and M. Morari. Internal Model Control: Robust Digital Controller Synthesis for Multivariable Open-Loop Stable or Unstable Processes. *International Journal of Control*, 54(3):665–704, 1991.
- [145] G. Zames. Feedback and Optimal Sensitivity: Model Reference Transformations, Multiplicative Semi-Norms and Approximate Inverses. *IEEE Transactions on Automatic* Control, 26:301-320, 1981.