

Chapitre 8

Introduction aux méthodes rigoureuses de distillation multicomposant

8.1 Principe de résolution

Les méthodes présentées dans les chapitres précédents ne s'appliquent qu'à des cas particuliers:

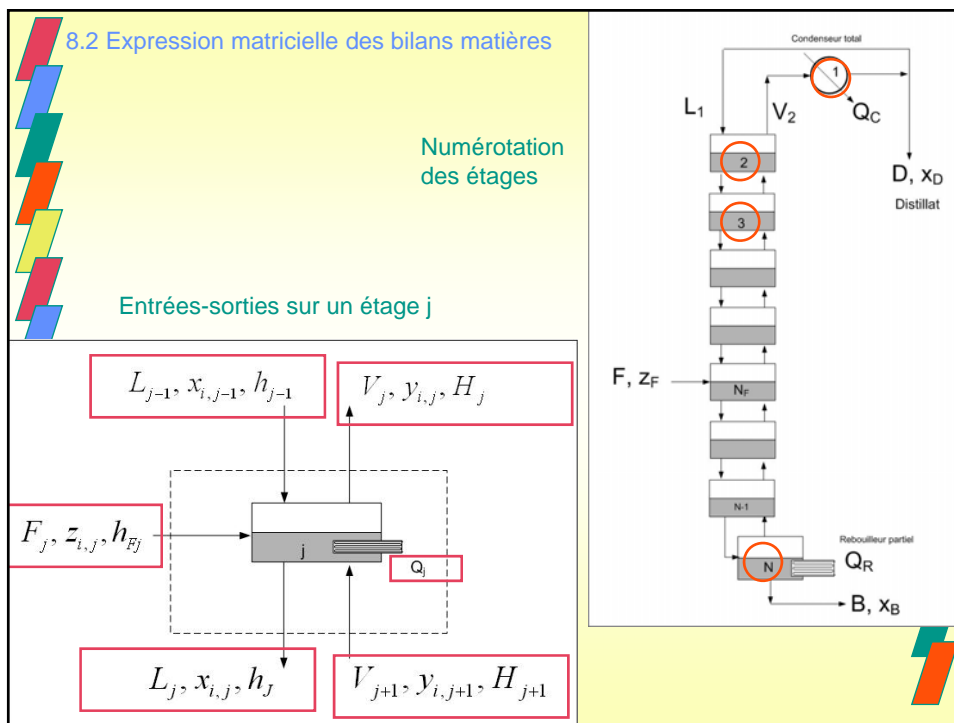
- pour des **systèmes binaires**, avec la méthode de McCabe et Thiele lorsque les hypothèses simplificatrices de Lewis sont applicables ou avec la méthode de Ponchon-Savarit dans le cas contraire.
- pour la détermination d'une **solution approximative** à une distillation multicomposant en utilisant l'approche FUG (Fenske-Underwood-Gilliland).

Les méthodes rigoureuses nécessitent la résolution sur tous les étages de la colonne des équations « MESH »

- de bilans matières (M),
- d'équilibre liquide-vapeur (E),
- des contraintes sur les fractions molaires (S)
- et de bilan d'enthalpie (H).

$$\sum_{i=1}^C x_i = 1 \quad \text{et} \quad \sum_{i=1}^C y_i = 1$$

- Les premières méthodes de résolution du problème (dans les années 30) se faisaient par itération, à la main, étage par étage, équation par équation.
- Avec les ordinateurs, ces méthodes ont cependant rencontrées des problèmes de convergence. On a développé des méthodes (itératives elles aussi) de résolution par composant (et non plus par étage) qui conduisent à la résolution de système d'équations linéaires dont la solution s'obtient rapidement par inversion de matrices tridiagonales.
- De nombreux logiciels de CAO (UniSim, Aspen, ProSim) permettent ainsi la résolution exacte des opérations de distillation.
- Cependant, avant toute approche de résolution exacte, il est préférable de disposer d'une solution approximative du problème comme celle obtenue par la méthode FUG.



Le bilan matière partiel sur l'étage j par rapport au composé i (i varie de 1 à C):

$$L_{j-1}x_{i,j-1} + V_{j+1}y_{i,j+1} + F_j z_{i,j} - L_j x_{i,j} - V_j y_{i,j} = 0$$

On ignore les indices i:

$$L_{j-1}x_{j-1} + V_{j+1}y_{j+1} + F_j z_j - L_j x_j - V_j y_j = 0 \quad [8.1]$$

$$y_j = K_j x_j \quad \text{et} \quad y_{j+1} = K_{j+1} x_{j+1} \quad [8.2]$$

l_j, v_j les débits molaires de chaque composé i sortant des étages

$$x_j = \frac{l_j}{L_j} \quad \text{et} \quad x_{j+1} = \frac{l_{j+1}}{L_{j+1}} \quad [8.3]$$

En remplaçant 8.3 et 8.2 dans 8.1:

$$-l_{j-1} + \left(1 + \frac{V_j K_j}{L_j}\right) l_j + \left(-\frac{V_{j+1} K_{j+1}}{L_{j+1}}\right) l_{j+1} = F_j z_j \quad [8.4]$$

$$-l_{j-1} + \left(1 + \frac{V_j K_j}{L_j}\right) l_j + \left(-\frac{V_{j+1} K_{j+1}}{L_{j+1}}\right) l_{j+1} = F_j z_j \quad [8.4]$$

$$A_j l_{j-1} + B_j l_j + C_j l_{j+1} = D_j \quad [8.5]$$

$$A_j = -1 \quad B_j = 1 + \frac{V_j K_j}{L_j} \quad [8.6]$$

$$C_j = -\frac{V_{j+1} K_{j+1}}{L_{j+1}} \quad D_j = F_j z_j$$

Équ. 8.4 et 8.5 sont valables pour $2 \leq j \leq N$ et pour les C composés.

Si il n'y a pas d'alimentation alors $F_j = D_j = 0$

Pour le condenseur total, $j=1$, le bilan matière s'écrit:

$$L_1 x_1 + D x_D - V_2 y_2 = F_1 z_1 \quad [8.7]$$

$$x_1 = x_D, \quad y_2 = K_2 x_2, \quad x_1 = \frac{l_1}{L_1}$$

$$C_1 l_2 + B_1 l_1 = D_1 \quad [8.8]$$

$$B_1 = 1 + \frac{D}{L_1} \quad C_1 = -\frac{V_2 K_2}{L_2} \quad D_1 = F_1 z_1$$

Pour le rebouilleur partiel, $j=N$, le bilan s'écrit :

$$-L_{N-1} x_{N-1} + B x_B + V_N y_N = F_N z_N \quad [8.10]$$

$$y_N = K_N x_N, \quad l_N = L_N x_N = B x_B$$

$$A_N l_{N-1} + B_N l_N = D_N \quad [8.11]$$

$$A_N = -1 \quad B_N = 1 + \frac{V_N K_N}{L_N} = 1 + \frac{V_N K_N}{B} \quad D_N = F_N z_N$$

Pour chaque composé, l'ensemble des équations 8.5, 8.8 et 8.11 s'exprime:

$$\begin{bmatrix} B_1 & C_1 & 0 & 0 & 0 & \cdot & 0 & 0 & 0 & 0 \\ A_2 & B_2 & C_2 & 0 & 0 & \cdot & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & A_3 & B_3 & C_3 & 0 & \cdot & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdot & A_{N-2} & B_{N-2} & C_{N-2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdot & 0 & A_{N-1} & B_{N-1} & C_{N-1} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdot & 0 & 0 & A_N & B_N \end{bmatrix} \begin{bmatrix} l_1 \\ l_2 \\ l_3 \\ \cdot \\ l_{N-2} \\ l_{N-1} \\ l_N \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} D_1 \\ D_2 \\ D_3 \\ \cdot \\ D_{N-2} \\ D_{N-1} \\ D_N \end{bmatrix} \quad [8.13]$$

Si on connaît les coefficients A_j B_j C_j D_j

On peut calculer des débits molaires de chaque composé l_j

La résolution de ce système d'équation linéaire se fait par inversion de matrice tridiagonale.

Pour résoudre ce problème certaines variables doivent être spécifiées. Il est pratique de se fixer les variables suivantes

$$F, z_i, T_F, N, N_F$$

$$p, T_{reflux}, \frac{L}{D}, D$$

```

graph TD
    A[Données d'équilibre et d'enthalpie] --> B[Spécifications du problème]
    B --> C[Estimés initiaux L_i, V_i, T_i à chaque étage]
    C --> D[Calcul des K_i pour les C composés sur chaque étage]
    D --> E[Calcul des coefficients A, B, C, D, Résolution équ. 8.13 et obtention des l_i]
    E --> F[Calcul des températures de bulle sur chaque étage]
    F --> G{Convergence sur T_i (T_b)}
    G -- Non --> D
    G -- Oui --> H[Résolution bilans d'enthalpie et obtention des L_i, V_i]
    H --> I{Convergence sur L_i, V_i}
    I -- Non --> D
    I -- Oui --> End[ ]
  
```

8.3 Estimés initiaux des flux molaires L_j et V_j et des températures

Pour initier les itérations, les coefficients A_j , B_j , C_j doivent être calculés.

Pour estimer L_j et V_j , on pourra utiliser les hypothèses de Lewis de flux molaires constants.

Les spécifications sur $\frac{L}{D}$ et D étant données, on peut alors estimer

les flux molaires liquide et vapeur des zones de rectification et d'épuisement et tenant compte des conditions de l'alimentation

$$L = \left(\frac{L}{D}\right)D \quad V = L + D \quad \bar{L} = L + qF$$

$$\bar{V} = V - (1 - q)F \quad q = \frac{\bar{L} - L}{F} = \frac{(H_V - H_F)}{(H_V - H_L)}$$

8.3 (suite) Estimés initiaux des températures

Pour les températures, on peut supposer une variation linéaire entre le pied et la tête entre les températures de bulle du distillat et du résidu.

La connaissance de ces températures va permettre le calcul des volatilités K_i de chaque composé sur chaque plateau.

Dans le cas où celles-ci seraient dépendantes des compositions, il faudrait les estimer en utilisant des composés clés (voir méthode FUG).

Commentaire : ces informations devraient être connues à l'issue de la résolution approximative qui doit être faite préalablement.

8.4 Calculs des points de bulle

Après la résolution du système 8.13, le débit molaire de chaque composé l_j est connu sur chaque étage j et on peut recalculer de nouvelles fractions molaires $x_j = \frac{l_j}{L_j}$

Le calcul du point de bulle avec ces nouvelles concentrations va permettre de recalculer la température du plateau

Avec ces nouvelles valeurs, on pourrait ainsi reprendre les calculs des sections 8.3 et 8.4. Cependant, la convergence du profil de température dans la colonne n'est pas garantie et la méthode de convergence dite méthode θ a été développée.

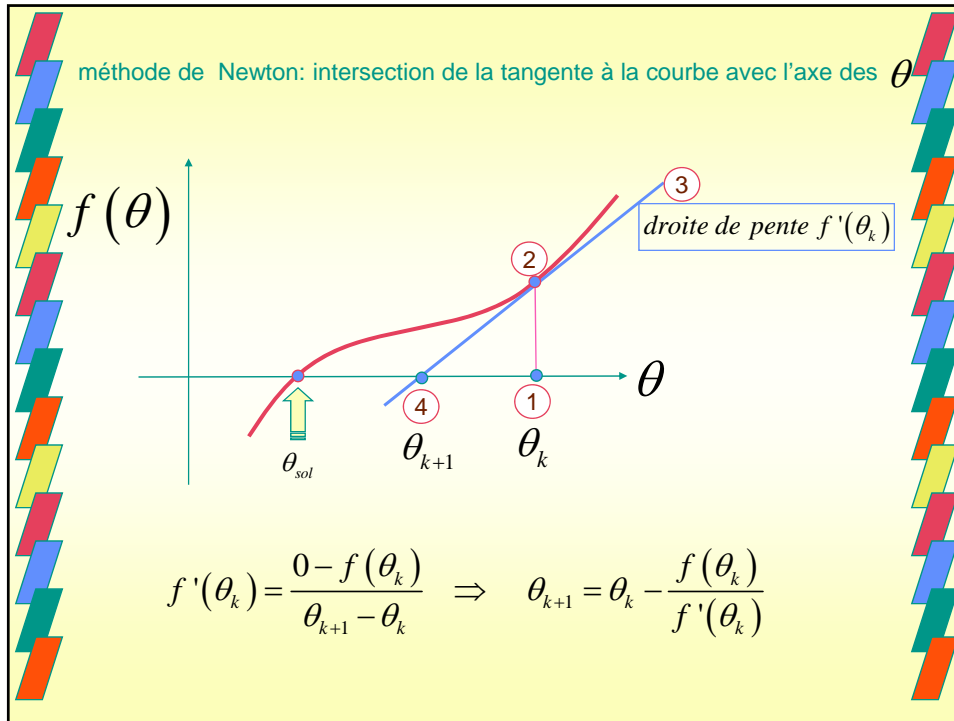
8.5 Méthode de convergence θ

Cette méthode définit le paramètre θ comme solution de l'équation

$$D_{\text{spécifié}} = \sum_{i=1}^C \left[\frac{Fz_i}{1 + \theta \left(\frac{B x_{i,B}}{D x_{i,D}} \right)_{\text{cal}}} \right] \quad [8.14]$$

Cette équation a une racine positive que l'on peut obtenir à l'aide de la méthode de Newton en cherchant le zéro de la fonction

$$f(\theta) = \sum_{i=1}^C \left[\frac{Fz_i}{1 + \theta \left(\frac{B x_{i,B}}{D x_{i,D}} \right)_{\text{cal}}} \right] - D_{\text{spécifié}} = 0 \quad [8.15]$$



$$\theta_{k+1} = \theta_k - \frac{f(\theta_k)}{f'(\theta_k)}$$

$$f(\theta) = \sum_{i=1}^C \frac{Fz_i}{1 + \theta \left(\frac{B x_{i,B}}{D x_{i,D}} \right)_{cal}} - D_{spécifié}$$

rappel: $\left(\frac{1}{u} \right)' = \left(\frac{-u'}{u^2} \right)$

Et d'une itération à l'autre

Équation 8.16:

$$\theta_{k+1} = \theta_k + \frac{f(\theta_k)}{\sum_{i=1}^C \frac{Fz_i \left(\frac{B x_{i,B}}{D x_{i,D}} \right)_{cal}}{\left\{ 1 + \theta_k \left(\frac{B x_{i,B}}{D x_{i,D}} \right)_{cal} \right\}^2}}$$

$\left(\frac{B x_{i,B}}{D x_{i,D}} \right)_{cal}$ se calcule à l'aide des solutions de l'équation 8.13

$$\left(B x_{i,B} \right) = l_{i,N} \quad \left(D x_{i,D} \right) = l_{i,1} / \left(\frac{L}{D} \right)$$

$$D_{\text{spécifié}} = \sum_{i=1}^C \frac{Fz_i}{1 + \theta \left(\frac{B x_{i,B}}{D x_{i,D}} \right)_{\text{cal}}} \quad [8.14] \quad D = \sum_{i=1}^C (D x_{i,D})$$

La nouvelle valeur de θ (équ. 8.16) permet de corriger les valeurs des débits molaires de chaque composé au distillat (8.19) et au résidu (8.20)

$$(D x_{i,D})_{\text{cor}} = \frac{Fz_i}{1 + \theta \left(\frac{B x_{i,B}}{D x_{i,D}} \right)_{\text{cal}}} \quad [8.19]$$

$$(B x_{i,B})_{\text{cor}} = (D x_{i,D})_{\text{cor}} \theta \left(\frac{B x_{i,B}}{D x_{i,D}} \right)_{\text{cal}} \quad [8.20]$$

Les équations 8.14, 8.19 et 8.20 donnent :

$$\sum_{i=1}^C (D x_{i,D})_{\text{cor}} = D_{\text{spécifié}} \quad \sum_{i=1}^C (B x_{i,B})_{\text{cor}} = B = F - D_{\text{spécifié}}$$

La méthode de convergence θ impose le respect des débits de distillat et de résidu.

Les débits molaire liquide de chaque composé, sur chaque étage sont alors corrigés, dans la zone de rectification, et dans la zone d'épuisement:

$$(l_{i,j})_{\text{cor}} = \frac{(D x_{i,D})_{\text{cor}}}{(D x_{i,D})_{\text{cal}}} (l_{i,j})_{\text{cal}} \quad (l_{i,j})_{\text{cor}} = \frac{(B x_{i,B})_{\text{cor}}}{(B x_{i,B})_{\text{cal}}} (l_{i,j})_{\text{cal}}$$

$$x_{i,j} = \frac{(l_{i,j})_{\text{cor}}}{\sum_{i=1}^C (l_{i,j})_{\text{cor}}}$$

Ce sont ces fractions molaires qui sont utilisées pour le calcul des températures de bulles T_j sur chaque étage. La convergence des températures T_j s'observe lorsque $\theta \rightarrow 1 \pm 10^{-5}$

8.6 Expression matricielle des bilans d'enthalpie

Après convergence des températures, il faut tenir compte des bilans d'enthalpie sur chaque étage qui s'écrit :

$$L_j h_j + V_j H_j = L_{j-1} h_{j-1} + V_{j+1} H_{j+1} + F_j h_{F_j} + Q_j \quad [8.26]$$

pour $2 \leq j \leq N-1$

Le bilan matière entre le dessous d'un étage j et le haut de la colonne:

$$L_j = V_{j+1} - D + \sum_{k=1}^j F_k \quad L_{j-1} = V_j - D + \sum_{k=1}^{j-1} F_k \quad [8.27]$$

En remplaçant 8.27 dans 8.26

$$\begin{aligned} V_{j+1}(h_j - H_{j+1}) + V_j(H_j - h_{j-1}) = & \quad [8.28] \\ F_j h_{F_j} + Q_j - D(h_{j-1} - h_j) - \left(\sum_{k=1}^j F_k \right) h_j + \left(\sum_{k=1}^{j-1} F_k \right) h_{j-1} \end{aligned}$$

Pour le condenseur total en tête ($j=1$) $V_2 = L_1 + D$ et $h_1 = h_D$

le bilan d'enthalpie: $Q_1 + V_2 H_2 + F_1 h_{F1} = (L_1 + D) h_1 = V_2 h_1$

$$V_2(h_1 - H_2) = Q_1 + F_1 h_{F1} \quad [8.30]$$

Pour le rebouilleur partiel en pied ($j=N$) $L_{N-1} = B + V_N - F_N$

$$B h_B + V_N H_N = L_{N-1} h_{N-1} + F_N h_{F_N} + Q_N$$

$$V_N(H_N - h_{N-1}) = Q_N + F_N h_{F_N} + B(h_{N-1} - h_N) - F_{N-1} h_{F_{N-1}} \quad [8.33]$$

pour $2 \leq j \leq N-1$

$$V_{j+1}(h_j - H_{j+1}) + V_j(H_j - h_{j-1}) = \quad [8.28]$$

$$F_j h_{F_j} + Q_j - D(h_{j-1} - h_j) - \left(\sum_{k=1}^j F_k \right) h_j + \left(\sum_{k=1}^{j-1} F_k \right) h_{j-1}$$

Les équations 8.33, 8.30 et 8.28 peuvent s'écrire sous la forme matricielle :

$$\begin{bmatrix}
 B_{E1} & C_{E1} & 0 & 0 & 0 & \cdot & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 0 & B_{E2} & C_{E2} & 0 & 0 & \cdot & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 0 & 0 & B_{E3} & C_{E3} & 0 & \cdot & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\
 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdot & 0 & B_{EN-2} & C_{EN-2} & 0 \\
 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdot & 0 & 0 & B_{N-1} & C_{EN-1} \\
 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdot & 0 & 0 & 0 & B_{EN}
 \end{bmatrix}
 \begin{bmatrix}
 V_1 \\
 V_2 \\
 V_3 \\
 \cdot \\
 V_{N-2} \\
 V_{N-1} \\
 V_N
 \end{bmatrix}
 =
 \begin{bmatrix}
 D_{E1} \\
 D_{E2} \\
 D_{E3} \\
 \cdot \\
 D_{EN-2} \\
 D_{EN-1} \\
 D_{EN}
 \end{bmatrix}
 \quad [8.34]$$

$B_{E1} = 0 \quad C_{E1} = h_1 - H_2 \quad D_{E1} = F_1 h_{F1} + Q_1$

pour $2 \leq j \leq N-1 \quad B_{Ej} = H_j - H_{j-1} \quad C_{Ej} = h_j - H_{j+1}$

$D_{Ej} = F_j h_{Fj} + Q_j - D(h_{j-1} - h_j) - \left(\sum_{k=1}^j F_k \right) h_j + \left(\sum_{k=1}^{j-1} F_k \right) h_{j-1}$

$B_{EN} = H_N - H_{N-1} \quad D_{EN} = F_N h_{FN} + Q_N + B(h_{N-1} - h_N) - F_N h_{N-1}$

Le calcul des enthalpies des courants liquide ou vapeur pour des mélanges idéaux s'obtient à partir des enthalpies des composés purs

\tilde{h}_i, \tilde{H}_i calculées à la température de l'étage T_j :

$$h_{j(T_j)} = \sum_{i=1}^C x_{i,j} \tilde{h}_{i(T_j)} \quad H_{j(T_j)} = \sum_{i=1}^C y_{i,j} \tilde{H}_{i(T_j)}$$

$$\tilde{h}_{T_j} = \tilde{h}_{T_{ref}} + C_{PL} (T_j - T_{ref})$$

$$\tilde{H}_{T_j} = \tilde{H}_{T_{ref}} + C_{PV} (T_j - T_{ref}) + \lambda_{i,T_{ref}}$$

$\lambda_{i,T_{ref}}$ chaleur latente de vaporisation du composé pur i

Dans le cas d'une colonne adiabatique on aurait :

$$Q_j = 0 \text{ pour } 2 \leq j \leq N-1; \quad Q_N = Q_{\text{Rebouilleur}}; \quad Q_1 = Q_{\text{Condenseur}}$$

Pour le condenseur total, l'énergie à retirer s'exprime par :

$$Q_1 = V_2 (h_D - H_2) = D \left(1 + \frac{L}{D} \right) (h_D - H_2)$$

Pour le rebouilleur partiel, l'énergie à fournir s'exprime à partir du bilan d'enthalpie sur toute la colonne :

$$Q_N = Dh_D + Bh_B - \left(\sum_{k=1}^N F_k h_{F_k} \right) - Q_1$$

L'inversion de la matrice 8.34 donne les nouvelles valeurs de V_j . Des nouvelles valeurs de L_j sont estimées avec l'équation 8.27.

$$L_j = V_{j+1} - D + \sum_{k=1}^J F_k$$

On pourra reprendre alors les calculs à la section 8.3 et ce jusqu'à convergence. Entre 2 itérations k et $k+1$

$$\left| \frac{L_{j,k+1} - L_{j,k}}{L_{j,k}} \right| < \varepsilon$$

$$\left| \frac{V_{j,k+1} - V_{j,k}}{V_{j,k}} \right| < \varepsilon$$

Une valeur de ε entre 10^{-5} et 10^{-4} peut être utilisée.

```

graph TD
    A[Données d'équilibre et d'enthalpie] --> B[Spécifications du problème]
    B --> C[Estimés initiaux Lj, Vj, Tj à chaque étage]
    C --> D[Calcul des Kj pour les C composés sur chaque étage]
    D --> E[Calcul des coefficients A, B, C, D. Résolution équ. 8.13 et obtention des lj]
    E --> F[Calcul des températures de bulle sur chaque étage]
    F --> G{Convergence sur Tj}
    G -- Non --> D
    G -- Oui --> H[Résolution bilans d'enthalpie et obtention des Lj, Vj]
    H --> I{Convergence sur Lj, Vj}
    I -- Non --> D
    I -- Oui --> J[Fin]
  
```