

Cours IN103 Projet Matlab 2010-2011

Patrice Paricaud, ENSTA-ParisTech.

Email : patrice.paricaud@ensta-paristech.fr

Optimisation Technico-économique d'un Procédé de Fabrication du Bioéthanol.

I. Introduction

La production de bioéthanol nécessite un apport d'énergie important notamment lors de l'étape de séparation, entraînant non seulement des coûts de production mais également des émissions de gaz à effet de serre. Il convient donc de s'assurer que la fabrication du biocarburant nécessite le moins possible d'énergie et qu'elle respecte au mieux l'environnement. Matlab va nous permettre de réaliser de manière automatique l'optimisation d'une partie du procédé de fabrication du bioéthanol, tenant compte des dépenses énergétiques, des coûts de maintenance et des contraintes environnementales (quotas d'émission de CO₂). Nous verrons notamment, au cours de ce projet, comment Matlab permet d'**optimiser une fonction à paramètres multiples, de résoudre une équation non linéaire, gérer des fichiers en entrée-sortie, et utiliser les fonctions graphiques**. Un problème d'**équations différentielles non linéaires** est également proposé dans la partie 3.

Le procédé doit fabriquer **100 000 tonnes** d'éthanol par an. La figure 1 montre le schéma simplifié du procédé utilisant la betterave à sucre comme matière première. On suppose que la solution en sortie du fermenteur a une concentration molaire $x_F=0.03$ en éthanol (correspondant à un degré alcoolique de 10% en vol.). Cette solution aqueuse d'éthanol est envoyée dans une colonne de distillation atmosphérique (**Pression = 760mmHg**). On doit obtenir de l'éthanol de concentration molaire $x_D= 0.84$ en tête de colonne. Le mélange est ensuite déshydraté pour obtenir le bioéthanol à 99%. Au bouilleur, à la sortie basse de la colonne, le flux sortant a une concentration molaire de $x_B=0.0001$ en éthanol.

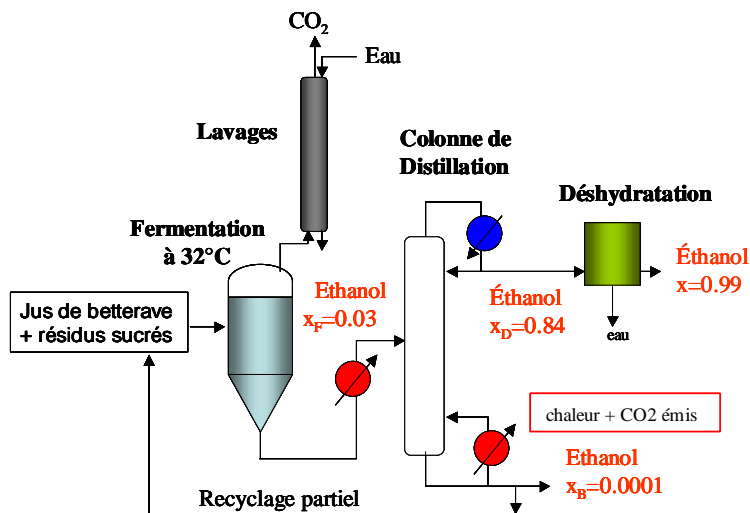


Fig. 1: Schéma de procédé. Fabrication du bioéthanol

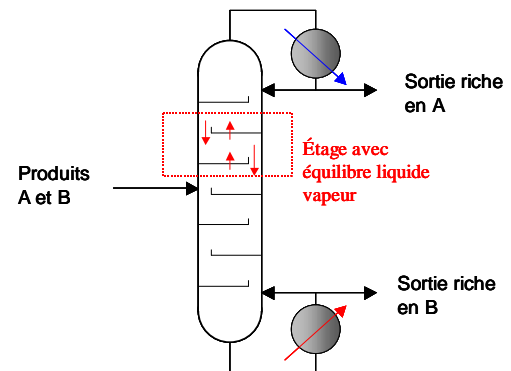


Fig. 2: colonne de distillation

Au cours de ce projet, nous allons nous intéresser uniquement au **dimensionnement et à l'optimisation économique de la colonne de distillation** (Fig. 1 et 2). Cette optimisation doit tenir compte des **exigences environnementales, économiques, et des contraintes de pureté des produits** en sortie du procédé de séparation. Nous ferons l'hypothèse que les solutions ne contiendront que de **l'eau et de l'éthanol**, donc nous négligerons la présence d'autres résidus (sucre, bactéries, produits annexes.).

La colonne de distillation doit permettre de **faire concentrer une solution eau+éthanol contenant 3% en mole d'éthanol pour obtenir une solution à 84% en mole d'éthanol**. Pour cela, nous ferons certaines hypothèses de modélisation et utiliseront la **méthode de McCabe et Thiele**. Lors de l'optimisation du coût, on tiendra compte des émissions de CO2 venant des dépenses énergétiques (le prix de la tonne de CO2 émis est de **17 euros**).

Notez que dans le descriptif du projet, les objectifs et algorithmes du projet sont bien mis en valeur et encadrés. Nous conseillons vivement de suivre l'ordre de ce descriptif, afin de décomposer le programme en sous-tâches et d'avancer plus rapidement dans le projet, le but étant que les élèves avancent rapidement et utilisent un maximum de fonction matlab.

I. Première partie du Projet : Etude des Equilibres Liquide-Vapeur du Mélange Eau - Ethanol

1.1 Diagramme de phase température - composition à pression fixée.

La colonne de distillation fonctionne selon l'équilibre liquide-vapeur du mélange eau-éthanol à la pression atmosphérique $P = 760 \text{ mmHg}$ (on suppose que P est constante le long de la colonne pour les calculs d'équilibre). Il est donc nécessaire de bien comprendre le comportement thermodynamique

de ce mélange à cette pression pour tout le domaine de composition. Pour cela, on étudie le **diagramme de phase température – composition** du mélange binaire eau+éthanol à la pression $P = 760 \text{ mmHg}$.

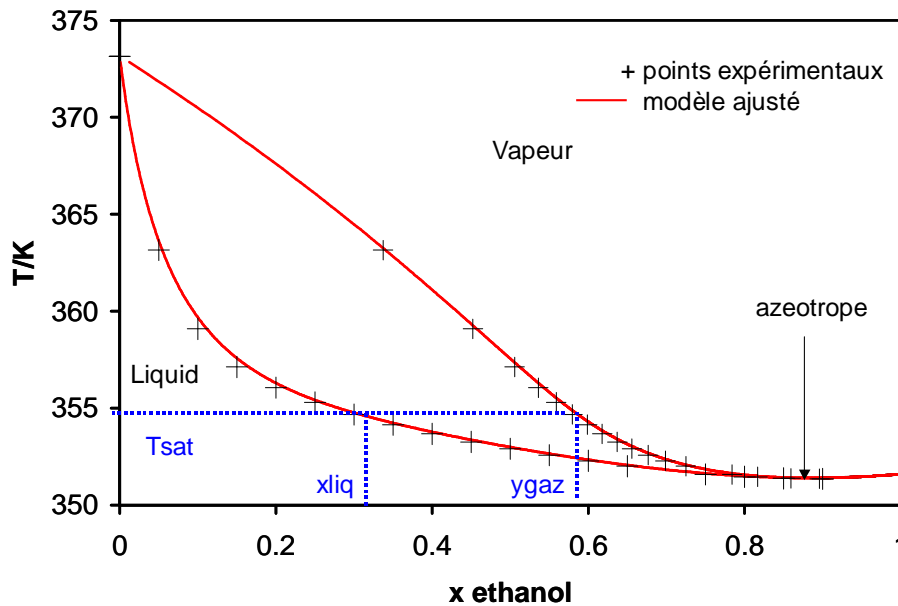


Fig. 3: Diagramme temperature- composition du mélange binaire ethanol-eau.

Ce diagramme fournit les compositions des deux phases liquides et vapeur et la température d'ébullition du mélange à l'équilibre, à la pression $P = 760 \text{ mmHg}$: la phase liquide contenant une fraction molaire x_{liq} en éthanol est en équilibre avec une phase vapeur ayant une fraction molaire y_{gaz} en éthanol (Fig. 3). Ce diagramme comporte un azéotrope autour de $x_{liq} = 0.9$, qui va limiter la séparation des deux produits. Le premier but du projet va être d'utiliser matlab afin d'ajuster un modèle thermodynamique (modèle NRTL) sur les points expérimentaux. Ce modèle nous servira par la suite pour le dimensionnement de la colonne de distillation.

1.2 Résolution de l'équilibre liquide-vapeur

On suppose que l'éthanol est le composé 1, et l'eau le composé 2. La résolution de l'équilibre de phase va consister à résoudre les équations suivantes :

a) Equations d'équilibre

- Egalité des potentiels chimiques des constituants dans les deux phases ($\mu_i^{gaz} = \mu_i^{liq}$):

$$P y_1 = P_1^0 x_1 \gamma_1 \quad (1)$$

$$Py_2 = P_2^0 x_2 \gamma_2 \quad (2)$$

avec :

P : pression du système

x_1, x_2 : fractions molaires des composés 1 et 2 dans la phase liquide (avec $x_1 + x_2 = 1$)

y_1, y_2 : fractions molaires des composés 1 et 2 dans la phase vapeur (avec $y_1 + y_2 = 1$) .

P_1^0, P_2^0 : pressions de vapeur des composés purs 1 et 2. P_1^0, P_2^0 sont des fonctions de T .

γ_1, γ_2 : coefficients d'activités des composés 1 et 2 dans la phase liquide. γ_1, γ_2 sont des fonctions de la température T et des fractions molaires x_1, x_2 .

- Egalité de la pression dans les deux phases à la pression fixée $P = 760$ mmHg. (3)

b) Pressions de vapeur des composés purs

Les pressions de vapeur P_1^0, P_2^0 pour l'éthanol et l'eau sont données par la corrélation suivante:

$$\text{Log}_{10} P_i^0 = A_i + B_i/T + C_i \text{Log}_{10} T + D_i T + E_i T^2 \quad (4)$$

T : température en Kelvin

P_i^0 : pression de vapeur en mmHg

Avec pour l'éthanol :

$A_1 = 23.8442$; $B_1 = - 2864.2$; $C_1 = - 5.0474$; $D_1 = 3.7448\text{E-}11$; $E_1 = 2.7361\text{E-}07$;

Pour l'eau :

$A_2 = 29.8605$; $B_2 = - 3152.2$; $C_2 = - 7.3037$; $D_2 = 2.4247\text{E-}09$; $E_2 = 1.809\text{E-}06$

Log_{10} : logarithme en base 10

Travail sous matlab : on écrira une fonction $p0 = \text{psat}(T)$, ayant en variable d'entrée la température T (scalaire) et en sortie le vecteur $p0$ de dimension 2, contenant les valeurs des deux pressions de vapeur à la température T .

Test de la fonction matlab pour les pressions de vapeur : à $T = 300\text{K}$, vérifiez que les pressions de vapeur de l'éthanol et de l'eau sont respectivement $P_1^0 = 65.8370$ mmHg, $P_2^0 = 26.5355$ mmHg.

c) Coefficients d'activité

Les coefficients d'activités γ_i sont donnés par le **modèle thermodynamique NRTL** selon:

$$\ln \gamma_1 = x_2^2 \left(\tau_{21} \left(\frac{G_{21}}{x_1 + x_2 G_{21}} \right)^2 + \frac{\tau_{12} G_{12}}{(x_2 + x_1 G_{12})^2} \right) \quad (5)$$

$$\ln \gamma_2 = x_1^2 \left(\tau_{12} \left(\frac{G_{12}}{x_2 + x_1 G_{12}} \right)^2 + \frac{\tau_{21} G_{21}}{(x_1 + x_2 G_{21})^2} \right) \quad (6)$$

avec $\tau_{ij} = \frac{g_{ij}}{RT}$ et $G_{ij} = \exp(-0.3\tau_{ij})$, $R = 8.314510 \text{ J/mol}$

tels que $g_{11} = g_{22} = 0$. Les paramètres $g_{12} \neq 0$ et $g_{21} \neq 0$ sont les deux paramètres du modèle NRTL qui caractérisent le mélange étudié et doivent être optimisés sur les données expérimentales.

Travail sous matlab : on écrira une fonction NRTL(T,x,g), ayant en entrée la température T, le vecteur de composition x(i) de dimension 2 et la matrice de paramètre g(i,j), et en sortie, le vecteur gamma(i) tel que

```
gamma=NRTL ( T , x , g )
```

```
gamma ( 1 ) = ...
```

```
gamma ( 2 ) = ...
```

Test de la fonction NRTL :

Pour $T = 300$, $x_1 = 0.3$, $x_2 = 0.7$, $g_{12} = 100$, $g_{21} = -200$ (paramètres de test), vérifiez que :

$$\gamma_1 = 0.9799 \text{ et } \gamma_2 = 0.9964 .$$

d) Algorithme de calcul d'équilibre à composition et P fixée.

Il est possible de montrer à partir des équations (1), (2) et (3) que l'on doit résoudre une équation non linéaire à 1 inconnue (l'inconnue est la température T), donnée par :

$$f(T) = 1 - \sum_{i=1,2} x_i \gamma_i(T, x_i) \frac{P_i^0(T)}{P} = 0 \quad (7)$$

Le problème est donc de trouver la température T telle que la fonction $f(T) = 0$, pour une pression P donnée et une composition liquide x_i fixée.

Une fois T déterminée et l'Eq. (7) résolue, les y_i sont alors obtenus par $y_i = x_i \gamma_i(T, x_i) \frac{P_i^0(T)}{P}$ (8)

Travail sous matlab : on écrira une fonction $[y,T] = \text{tsatur}(x,g,P)$, ayant en entrée la température P , le vecteur de composition liquide x et la matrice g de paramètres NRTL. En sortie, cette fonction donnera la température T et le vecteur de composition y .

Il s'agit de résoudre un système non linéaire à une équation (Eq. (7)) et une inconnue (T). On définira une fonction $f = \text{fsys1}(T)$ qui aura en entrée la température T et en sortie la valeur f de la fonction à annuler. On utilisera la fonction matlab **fzero** et des variables globales.

Voici dessous l'algorithme détaillé du calcul d'équilibre à T et x fixées:

Définir une fonction $[y,T] = \text{tsatur}(x,g,P)$ dans le fichier `tsatur.m`

Dans le fichier `tsatur.m` :

- définir les variables globales `gcom`, `xcom`, `ycom`, et `pcom`
- Sauvegarder `g`, `x` et `p` dans `gcom`, `xcom` et `pcom`
- initialiser `t0 = 300`
- appeler la fonction matlab `t = fzero(@fsys1,t0)`
- `y = ycom`

Dans le fichier `fsys1.m` :

Définir la fonction `f = fsys1(t)`

Définir les variables `xcom`, `gcom`, `ycom` et `pcom` en variables globales

Appeler la fonction `pvap(t)` pour calculer les pressions de vapeur $p_0(i)$ à la température t

Appeler la fonction `NRTL(t,x,g)`

Calculer pour $i = 1,2$ $ycom(i) = xcom(i) * p_0(i) * \gamma(i) / pcom$

Calculer $f = 1 - \text{somme sur } i \text{ des } ycom(i)$ (voir l'équation (7))

Test de l'algorithme:

- 1) pour $P = 760$ mmHg, $x_1=0.3$, $x_2=0.7$. $g_{12} = 100$, $g_{21} = -200$, vérifier que $T = 364.8054$, $y_1=0.4860$
- 2) Tracer le diagramme $x-T$; $y-T$ et $x-y$ avec les mêmes valeurs de $g_{12} = 100$ et $g_{21} = -200$
(voir la procédure de traçage ci-dessous).

Algorithme de traçage des diagrammes à P et g données:

On pourra utiliser une fonction `tracage(P,g)` ayant comme variable d'entrée P et g . Dans cette fonction on écrira:

$i=0$

Pour $x_1 = 0$ à $x_1 = 1$, avec un pas de 0.01

$i = i + 1$

$x(1)=x_1$ et $x(2)=1-x_1$

Calculer y_1 et T pour chaque valeur de x_1 en appelant la fonction `tsatur(x, g, P)`

Enregistrer les valeurs de x_1 , y_1 et T dans des vecteurs `xcal(i)`, `ycal(i)`, `Tcal(i)`

Fin de boucle

Tracer sur le même diagramme $T = f(x_1)$, $T = f(y_1)$ à l'aide des vecteurs `xcal`, `ycal`, `Tcal` et de la fonction matlab `plot`. Tracer sur une autre figure le diagramme $y_1 = y_1(x_1)$.

Labelliser les diagrammes avec les fonctions matlab `set`, `xlabel` et `ylabel`

E) Optimisation des données expérimentales

Optimiser des données expérimentales à l'aide d'un modèle dépendant de plusieurs paramètres est une tâche très courante pour un ingénieur en R&D. Matlab permet de réaliser facilement cette tâche grâce à ses fonctions intégrées d'optimisation (`fminsearch`, ...), et permet de visualiser rapidement les résultats. Ici, nous allons optimiser les paramètres g_{12} et g_{21} du modèle NRTL sur les données expérimentales (voir Tableau 1).

Tableau 1 : Données d'équilibres liquide-vapeur du mélange éthanol-eau à P=760mmHg

x éthanol = x_1	y éthanol = y_1	T en Kelvin
0	0	373.15
0.05	0.3372	363.15
0.1	0.4521	359.08
0.15	0.5056	357.12
0.2	0.5359	356.05
0.25	0.5589	355.29
0.3	0.5794	354.67
0.35	0.5987	354.14
0.4	0.6177	353.67
0.45	0.6371	353.25
0.5	0.6558	352.9
0.55	0.6765	352.57
0.6	0.6986	352.28
0.65	0.725	352
0.75	0.784	351.57
0.8	0.8167	351.45
0.85	0.8591	351.37
0.9	0.8959	351.35
0.95	0.9474	351.39
1	1	351.48

Télécharger le fichier de donnée sur la page web: <http://ucp.ensta.fr/enseignement/matlab.htm>. Pour optimiser les paramètres, nous utiliserons la fonction objective $fobj(par)$ telle que

$$fobj = \sum_{k=1}^{npointexp} (y_{1,cal,k} - y_{1,exp,k})^2 + (T_{cal,k} - T_{exp,k})^2 \quad (9)$$

Algorithme de l'optimisation :

1. Télécharger le fichier ethanol_eau.dat (voir lien si dessus) contenant les données du Tableau 1.
2. Dans un programme principal prin.m (script principal):
 - enregistrer les données à partir du fichier ethanol_eau.dat dans une matrice DAT (utiliser la fonction matlab **load**. DAT sera définie en variable globale dans prin.m et dans fobj.m
 - définir un vecteur de dimension 2 (vecteur par0) qui contiendra les paramètres initiaux g12 et g21.
 - faire appel à la fonction parnew = **fminsearch(@fobj, par0)**, où «fobj» est le nom de la fonction objectif à optimiser, et «parnew» le nouveau vecteur de paramètres après optimisation.
 - modifier la fonction tracage(P,g) pour tracer sur le même graphique les courbes x-t , y-t calculées et les données expérimentales (comme sur la Fig 3). Faite de même avec le graphique x-y. On fera appel a la fonction tracage(P,g), avec les nouvelles matrice g optimisée.

3. Ecrire la fonction f=fobj (par) : dans cette fonction, on aura :

La matrice DAT sera mis en variable globale ici en commun avec prin.m

Utiliser la fonction « size » pour connaître la dimension de DAT et le nombre de point expérimentaux

$g_{12}=\text{par}(1)$, $g_{21}=\text{par}(2)$

$P = 760$

$f = 0$

Pour $k = 1$ à n_{pointexp}

Fixer la composition $x(1) = \text{DAT}(k,1)$ et $x(2) = 1-x(1)$

Calculer y et T en faisant appel à la fonction $[y,T] = \text{tsatur}(x,g,P)$

$f = f + (T - \text{DAT}(k,3))^2 + (y(1)-\text{DAT}(k,2))^2$ selon l'équation (9)

Fin de boucle

II. Deuxième partie du Projet: dimensionnement et optimisation de la colonne, en utilisant la méthode de McCabe et Thiele.

La figure 4 décrit le système à étudier et les variables du problème.

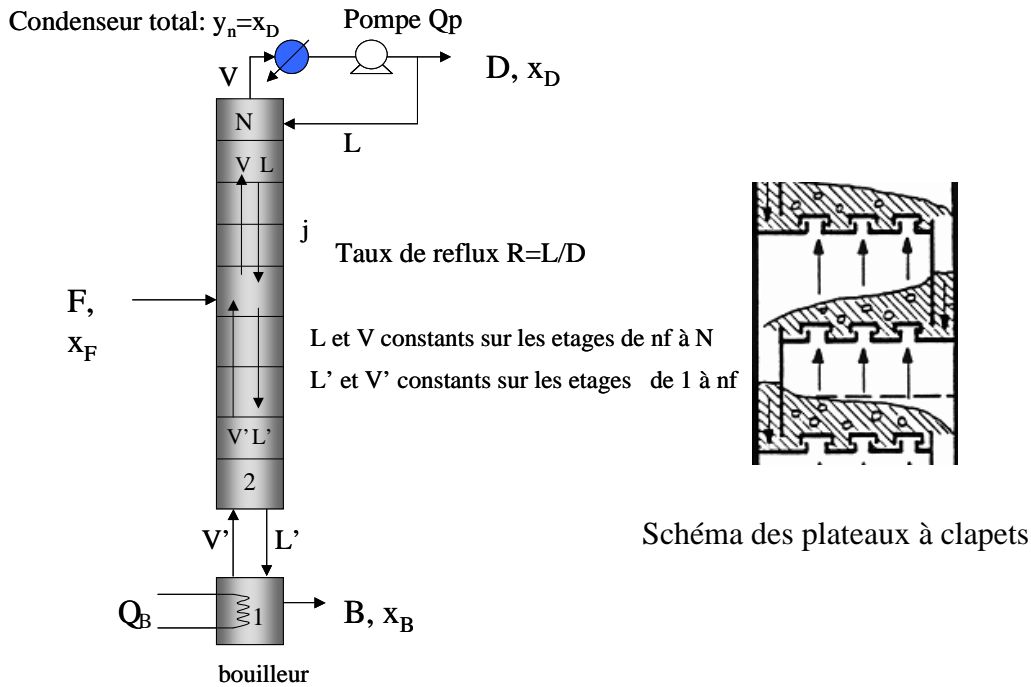


Fig. 4 : schéma de la colonne de distillation.

Les variables et données du problème sont :

F : débit molaire total en entrée (en kmol/h). On suppose que F est liquide à saturation, et $L' = L + F$.

x_f : fraction molaire en éthanol dans le débit d'entrée D . On fixe $x_f = 0.03$.

D : débit de distillat (en kmol/h). D est tel que $D = 295.43 \text{ kmol/h}$ (correspondant aux **100 000 tonnes d'éthanol** produites par an).

x_D : fraction molaire en éthanol dans le débit de distillat D . On fixe $x_D = 0.84$.

B : débit en sortie de bouilleur (en kmol/h)

x_B : fraction molaire en éthanol dans le débit de sortie du bouilleur B . On fixe $x_B = 0.0001$.

x_k, y_k : fractions molaires en éthanol du liquide et de la vapeur en équilibre à l'étage k .

T_k : température à l'étage k . T_k et y_k dépendent de x_k via l'équilibre liquide vapeur.

N : nombre d'étages de la colonne.

Q_B : puissance fournie au bouilleur (grâce à un échangeur de chaleur avec de la vapeur surchauffée)

P : pression constante tout le long de la colonne : $P = 760 \text{ mmHg}$.

R : taux de reflux. $R = L/D$

L : débit de liquide renvoyé dans l'étage N , avec $L = RD$. Le débit L est supposé constant tout le long de la colonne au-dessus de l'alimentation F .

V : débit de vapeur sortant de l'étage N . On sait que : $V = L + D$. Le débit V est supposé constant tout le long de la colonne au-dessus l'alimentation F .

L' : débit de liquide rentrant dans le bouilleur, avec $L' = L + F$. Le débit L' est supposé constant tout le long de la colonne au-dessous l'alimentation F .

V' : débit de vapeur sortant du bouilleur avec $V' = V$. $V'=V$ est supposé constant tout le long de la colonne et $L' = V + B = F + L$

Q_p : puissance fournie par la pompe en sortie de condenseur.

Q_C : Puissance récupérable au condenseur.

Il est possible de montrer, à x_D, x_B, P et D fixés, que **l'unique degré de liberté restant du problème est le taux de reflux R** . Le but de ce projet est alors de calculer le coût de revient annuel de la colonne, pour un taux de reflux R donné, puis de trouver la valeur optimale de R (voir Fig. 5). R_{min} est le taux de reflux R minimal en dessous duquel la colonne ne peut pas fonctionner.

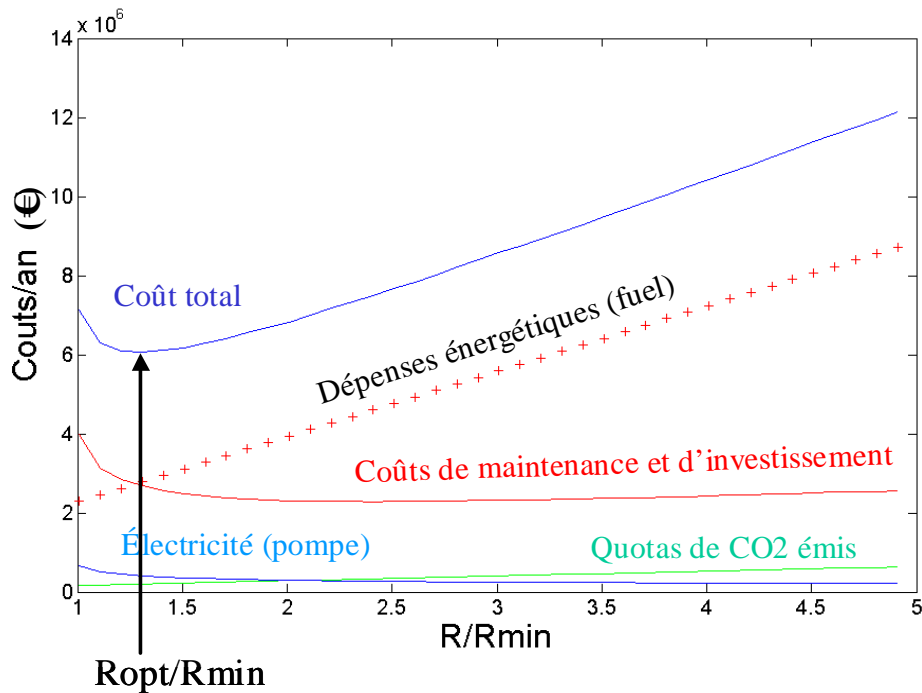


Fig.5 : Différents coûts en fonction du rapport R/R_{min} et valeur optimale de R

2.1 Mise en équations du problème

Bilan total en nombre de moles sur la colonne : débit total molaire entrant = somme des débits molaires sortant

$$F = B + D \quad (10)$$

Bilan en nombre de mole d'éthanol sur la colonne : débit molaire en éthanol entrant = débits molaires en éthanol sortants

$$Fx_F = Bx_B + Dx_D \quad (11)$$

- Bilan molaire sur le condenseur : $V = L + D$

- Bilan molaire sur le bouilleur : $L' = V + B$.

Soit le taux de reflux R avec $R = L/D$ (12)

- Bilan molaire en éthanol sur la partie haute de la colonne, sur les étages au-dessus de l'alimentation (voir Fig. 6 ci-dessous). On montre que

$$y_k = \frac{L}{V} x_{k+1} + \frac{D}{V} x_D \quad (13)$$

y_k : fraction molaire en éthanol de la phase vapeur à l'étage k.

x_{k+1} : fraction molaire en éthanol de la phase liquide à l'étage k+1.

x_D : fraction molaire en éthanol du distillat (sortie tête de colonne et condenseur)

D'après les Eq. (12) et (13),

$$\boxed{y_k = \frac{R}{R+1} x_{k+1} + \frac{1}{1+R} x_D} \quad (14)$$

L'équation (14) définit la **droite opératoire supérieure** reliant x_{k+1} à y_k .

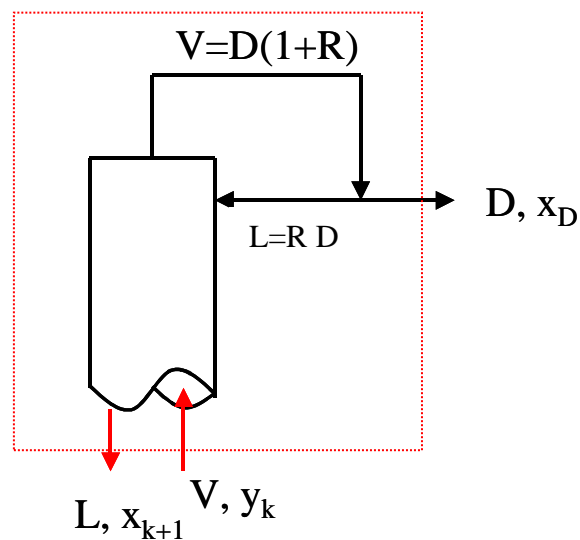


Fig. 6 : Partie haute de la colonne, au-dessus de l'étage d'alimentation. Bilan de matière sur la partie encadrée (moles en entrée = moles en sortie). On en déduit les Eq. (13) et (14).

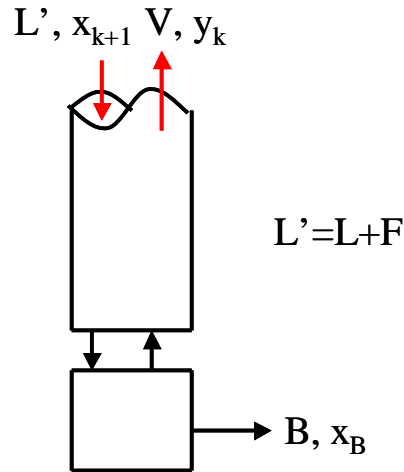


Fig. 7 : Partie basse de la colonne, au-dessous de l'étage d'alimentation

- Bilan molaire en éthanol sur la partie basse de la colonne, sur les étages au-dessous de l'alimentation F (voir Fig. 6 ci-dessous). On montre que

$$y_k = \frac{L'}{V} x_{k+1} - \frac{B}{V} x_B \quad (15)$$

y_k : fraction molaire en éthanol de la phase vapeur à l'étage k .

x_{k+1} : fraction molaire en éthanol de la phase liquide à l'étage $k+1$.

x_B : fraction molaire en éthanol en sortie de bouilleur.

L'équation (15) constitue **la droite opératoire inférieure**. Supposons que l'on fixe les fractions molaires x_D , x_B , le taux de reflux $R = L/D$, et le débit D . On peut alors en déduire les autres valeurs F , B , L , V et L' , à partir des équations de bilan de masse établies auparavant (Eq. (10), (11) et (12)):

Flux de matière :

$$F = D \frac{x_D - x_B}{x_F - x_B} \quad (16)$$

$$B = F - D = D \frac{x_D - x_F}{x_F - x_B} \quad (17)$$

$$L = RD \quad (18)$$

$$V = D(1 + R) \quad (19)$$

$$L' = L + F \quad (20)$$

Pour ce projet, on fixe les fractions molaires en éthanol:

$$x_D = 0.84, \quad x_B = 0.0001 \quad \text{et} \quad x_F = 0.03.$$

En supposant que l'usine fonctionne tous les jours et 24h/24, pour produire 100000 tonnes d'éthanol par an, il faut que

$$x_D D = \frac{100000 \times 10^6}{46} = 2.173 \times 10^9 \text{ mol/an}$$

donc le débit D en kmol/h vaut $D = \frac{100000 \times 10^3}{46 \times 0.84 \times 365 \times 24} = 295.43 \text{ kmol/h.}$

(masse molaire de l'éthanol = 46g/mol).

2.3 Méthode de McCabe et Thiele

La détermination du nombre d'étages de la colonne se fait de manière graphique grâce aux droites opératoires et au diagramme d'équilibre $y = f(x)$ du mélange binaire éthanol-eau (déterminé auparavant dans la partie I du projet). Il s'agit de la méthode de McCabe et Thiele. Matlab va nous permettre d'automatiser cette méthode et ainsi d'avoir des résultats très précis et instantanés. Matlab va nous permettre également de minimiser les coûts de la colonne et les dépenses énergétiques en faisant varier le paramètre R appelé **taux de reflux**.

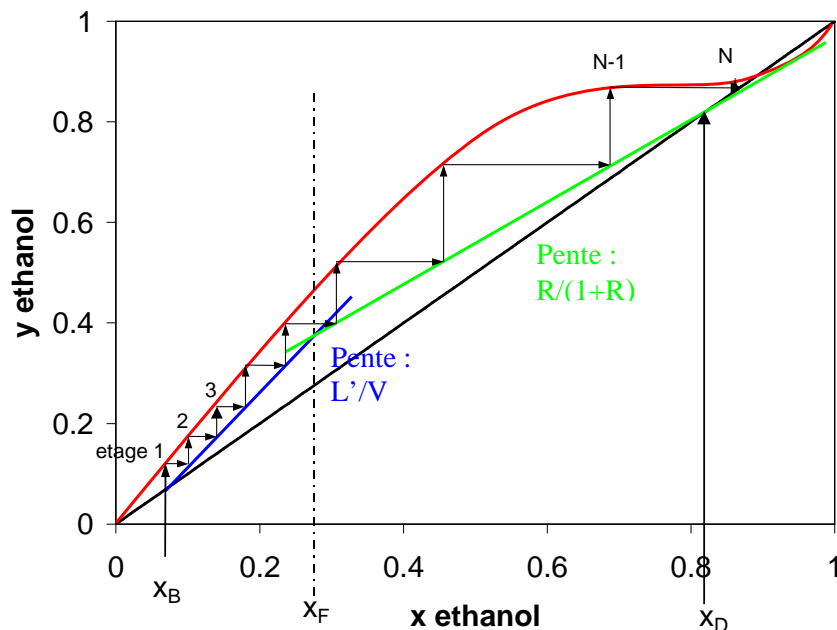


Figure. 8 Equilibre liquide-vapeur du mélange éthanol-eau. Méthode de McCabe-Thiele. Courbe rouge : courbe $y = f(x)$ d'équilibre liquide vapeur. Droite bleue : droite opératoire inférieure. Droite verte : droite opératoire supérieure. x_B : composition en éthanol au bouilleur (1^{er} étage). x_D : composition du distillat. x_F : composition de l'alimentation liquide saturée. N : nombre d'étages. Les flèches indiquent les itérations successives pour déterminer les étages.

a) Description de la méthode graphique:

- 1) On place tout d'abord x_B et x_D sur la droite $y = x$.
- 2) On trace la droite verticale passant par x_F . Pour une valeur de R choisie $> R_{min}$ (voir comment déterminer R_{min} dans la section .3 b)), on trace les deux droites opératoires passant par les points (x_D, x_D) , (x_B, x_B) , et de pentes respectives $L/V = R/(1+R)$ et L'/V (voir la figure 8). les trois droites doivent se couper au même point.
- 3) On trace la courbe d'équilibre $y = f(x)$.
- 4) Partant de x_B , on détermine la composition y_B de la vapeur en équilibre au bouilleur ($y_B = f(x_B)$, obtenue avec la fonction $tsatur(x, g, P)$). Le bouilleur correspond à l'étage 1 de la colonne. La composition du liquide x_2 à l'étage 2 est donnée par la droite opératoire inférieure. La composition de la vapeur y_2 à l'étage 2 est donnée par la courbe d'équilibre $y_2 = f(x_2)$.
- 5) On itère de cette manière jusqu'à ce que $x_i > x_F$. On obtient alors le nombre d'étage en dessous de l'alimentation F .
- 6) On utilise la droite opératoire supérieure pour obtenir x_{i+1} à partir de y_i . Puis y_{i+1} est obtenu par la courbe d'équilibre $y_{i+1} = f(x_{i+1})$.
- 7) On itère jusqu'à ce que $x_i > x_D$. On obtient alors le nombre total d'étage N avec $x_N > x_D$. Pour le dernier étage, x_N n'est pas exactement égale à la consigne x_D : cela est tout à fait normal car le nombre d'étage est un nombre entier et il est impossible d'obtenir exactement x_D .
- 8) Pour l'optimisation et l'estimation des coûts, on prendra un nombre N_{dec} d'étage non entier (décimal) égal à :

$$N_{dec} = N - (x_N - x_D) / (x_N - x_{N-1}) \quad (21)$$

b) Détermination du taux de reflux minimal R_{min}

D'après les Figures 8 et 9, il existe un taux de reflux minimal correspondant à un nombre d'étages nécessaires infinis pour respecter les consignes de composition x_B et x_D en sortie de colonne. Il s'agit donc dans un premier temps de déterminer R_{min} . Le taux R_{min} est obtenu lorsque les droites opératoires se croisent au point (x_F, y_F) de la courbe d'équilibre liquide vapeur $y = f(x)$ (voir la figure 9). On obtient donc R_{min} selon la formule:

$$R_{min} = \frac{x_D - y_F}{y_F - x_F} \quad (22)$$

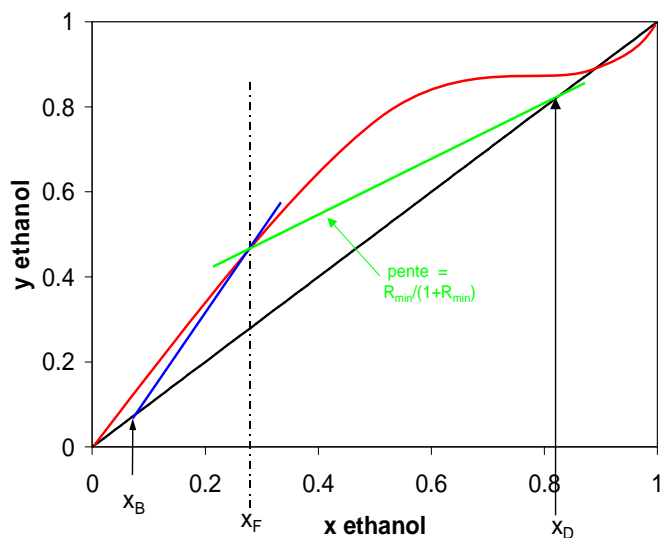


Figure 9 : Détermination du taux de reflux minimal R_{\min}

c) Détermination des dimensions réelles de la colonne

Une fois le nombre de plateaux (ou étages) théoriques déterminé, il est possible de déterminer les dimensions réelles de la colonne (hauteur et diamètre intérieur). On définit alors une hauteur équivalente de plateaux théoriques **HETP**, telle que la hauteur réelle **H** de la colonne vaut

$$\mathbf{H} = \mathbf{HETP} \ N_{\text{dec}} \quad (23)$$

N_{dec} étant donnée par l'équation (21). Ici, on prendra des plateaux ayant une **HETP de 0.7 mètres**. Les colonnes ne doivent pas être trop hautes : **H < 70m**, sinon la colonne n'est pas concevable.

Le diamètre optimal **Diam_{opt}** est déterminé selon les propriétés hydrodynamiques de la colonne (étude de mécanique des fluides), afin d'éviter les phénomènes d'engorgement et permettre une efficacité optimale. Le diamètre dépend de la vitesse de circulation de la vapeur dans la colonne et donc du débit V . Des études expérimentales sur pilote montrent que dans notre cas

$$\text{Diam}_{\text{opt}} = 0.1\sqrt{V} \quad (24)$$

où V est le débit de vapeur exprimé en kmol/heure. Le diamètre varie en général entre 2 et 6m.

d) Calcul des coûts annuels

Une fois le nombre de plateaux (ou étages) déterminés pour un taux de reflux $R > R_{\min}$ donné, nous devons calculer les coûts d'investissement et de fonctionnement d'une telle colonne. Ensuite, nous minimiserons ces coûts en faisant varier R .

Le coût total en euros par an, C_{tot} , est estimé selon la formule suivante :

$$\boxed{C_{tot} = C_{inv} + C_{ener} + C_{elec} + C_{CO2}} \quad (25)$$

avec :

C_{inv} : prix d'achat et de montage de la colonne divisé par 20 (en supposant que la colonne ait une durée de vie de 20 ans) plus coût de maintenance. On suppose que le coût C_{inv} est proportionnel au volume de la colonne.

On estime que :

$$C_{inv} = 10500(Diam_{opt})^2 H \quad (26)$$

où H et $Diam_{opt}$ sont en mètres et C_{inv} en euros/an.

C_{elec} : consommation en électricité pour faire fonctionner les pompes. Ces pompes permettent de compenser les pertes de charges dans la colonne. En appliquant la loi de Poiseuille, on trouve la perte de charge, et le coût C_{elec} est estimé à

$$C_{elec} = 2.12V^2 \frac{H}{(Diam_{opt})^4} \quad (27)$$

où H et $Diam_{opt}$ sont en mètres, V est le débit de vapeur en kmol/h, C_{elec} est en euros/an. Le coût

C_{ener} correspond aux dépenses énergétiques de chauffage de la colonne. Compte tenu du prix du gaz naturel (8c d'euros / kWh), C_{ener} est évalué à

$$\boxed{C_{ener} = 0.19Q} \quad (28)$$

où C_{ener} est en euros/ an et Q est la puissance nécessaire apportée sous forme de chaleur à la colonne (énergie entrante – énergie sortante), exprimée en kilo joule par heure.

Hypothèses simplificatrices : pour calculer Q, on néglige les enthalpies de mélange, et les enthalpies entrantes et sortantes: on ne tient compte que des enthalpies de changement d'état au bouilleur. On suppose également l'enthalpie de vaporisation ne dépend pas de la composition du mélange ni de la température.

$$\boxed{Q = Q_B = V \Delta H_{vap}} \quad (29)$$

V est le débit de vapeur en kmol/h, et $\Delta H_{vap} = 40000$ kJ/kmol.

Quotas de CO2 : Le prix de la tonne de CO2 émise à l'atmosphère est de **17 euros par tonne de CO2 émises**. Sachant que la masse de CO₂ produite pour obtenir 1kJ par combustion du gaz naturel est de 57 milligrammes, la masse (en tonnes) de CO₂ émis par an est de

$$m_{CO2} = 57 \times 10^{-9} Q \times 24 \times 365 \quad (30)$$

La somme à payer par an en euros est donc de

$$C_{CO_2} = 17m_{CO_2}$$

(31)

Travail sous Matlab de la partie II du projet:

Ecrire une fonction $ctot = cout(alpha)$ ayant en entrée la variable $alpha$ telle que $alpha = R/R_{min}$, et en sortie la valeur du coût.

Ordre des opérations dans le fichier `cout.m`:

- Fixer les variables P, x_B, x_D, D, x_F (valeur de l'énoncé).
- En déduire les débits F et B en kmol/h (Equations (16) et (17)),
- Fixer la valeur de la matrice g : paramètres NRTL optimisés obtenus dans la section I
- Faire appel à la fonction `tsatur` pour calculer y_F
- En déduire la valeur de R_{min} (Eq. (22))
- Calculer $R = alpha * R_{min}$
- En déduire L, L_{prim} et V en kmol/h (Eq. (18), (19) et (20))
- Partir de $k=0$
- définir $x_k = x_B$

Boucle tant que $x_k < x_F$

Vecteur de composition pour `tsatur` : $x(1)=x_k, x(2)=1-x_k$

trouver y_k en équilibre avec x_k en appelant la fonction $[y,t] = tsatur(x, g, P)$ tel que $y_k = y(1)$

incrémenter le nombre d'étages $k = k + 1$

sauvegarder les valeurs de la température, de $x(1)$ et de $y(1)$ dans des tableaux `xstage(k)`, `ystage(k)` et `Tstage(k)`

Utiliser la droite opératoire inférieure : $x_k = V/L_{prim} * (y_k + B/V * x_B)$

fin de la boucle

nombre d'étages sous l'alimentation : $N_{low} = k$

Boucle tant que $x_k < x_D$

Vecteur de composition pour `tsatur` : $x(1)=x_k, x(2)=1-x_k$

trouver y_k en équilibre avec x_k en appelant la fonction $[y,t] = tsatur(x, g, P)$ tel que $y_k = y(1)$

incrémenter le nombre d'étages $k = k + 1$

sauvegarder les valeurs de la température t , de $x(1)$ et de $y(1)$ dans des tableaux `xstage(k)`, `ystage(k)` et `Tstage(k)`

utiliser la droite opératoire supérieure : $x_k = V/L * (y_k - D/V * x_D)$

fin de la boucle

nombre entier total d'étage : $N_{total} = k$

nombre d'étages au-dessus de l'alimentation : $N_{Sup} = k - N_{low}$

nombre décimal d'étages : $N_{dec} = N_{total} - (x_k - x_D)/(x_k - x_{stage}(k))$ (Equation 21)

dimensions de la colonne

calculer la hauteur H : Eq. (23)

calculer le diamètre $diamopt$: Eq. (24)

Calculer le coût :

Coût d'investissement et maintenance : Eq. (27)

Coût de dépenses en électricité: Eq. (27)

Calculer la puissance énergétique de chauffage en kJoules par heure : Eq. (29)

Coût du à cette puissance : Eq. (28)

Masse de CO₂ émise par an : Eq. (30)

Coût de quotas de CO₂ émis : Eq. (31)

Cout total $ctot = \dots$ Eq. (25)

Dans le fichier `cout.m`, on mettra en variable globale toutes les variables que l'on souhaite afficher à partir du fichier principal.

Dans le fichier principal `princolonne.m`

Valeur initiale de alpha : $\alpha_0 = 2$.

Faire appel a `fminsearch (@cout,alpha0)` pour optimiser alpha en minimisant les coûts.

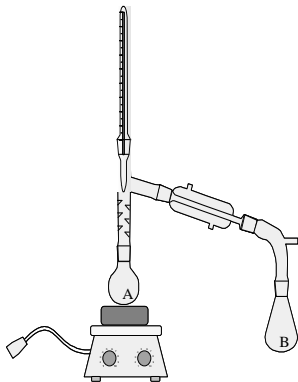
A l'aide de variables globales communes à `princolonne.m` et `cout.m`, tracer sur le même graphe les différents coûts en fonction de alpha (comme sur la figure 10).

Tracer les profils de température et de concentration en fonction des étages (on utilisera les tableaux $T_{stage}(k)$, $x_{stage}(k)$ et $y_{stage}(k)$ et un vecteur $ik = [1:k]$ => `plot(ik,Tstage)`

III. Distillation Discontinue

On étudie ici une distillation discontinue à un seul étage (alambic), le but étant ici d'utiliser **la résolution d'équations différentielles non linéaires avec Matlab**. Soit $N_A(t=0)$ le nombre de moles initial d'un mélange éthanol-eau contenu dans un récipient A.. On prend $N_A(t=0) = 100$ moles. La fraction molaire initiale $x_A(t=0)$ en éthanol est de 0.05. On suppose que la pression est constante et vaut $P=760\text{mmHg}$. On chauffe le récipient A avec une puissance chauffante constante $Q = 1\text{kW}$. On suppose que le mélange est déjà saturant au temps $t = 0$ (pas besoins de préchauffage). On refroidit et condense le débit V de vapeur sortant, puis on le récupère dans un autre récipient B (voir schéma ci-dessous).

Questions : Déterminer l'évolution des quantités de moles N_A , N_B , et des fractions molaires en éthanol x_A et x_B dans les deux récipients A et B. Combien de temps faut-il distiller pour avoir une fraction molaire en éthanol égale à 0.17 dans le récipient B, correspondant à un eau de vie à 40% en vol.? Quelle est alors la quantité d'eau de vie produite ? Tracer l'évolution de la température en fonction du temps.



En faisant un bilan molaire et énergétique, on montre que les équations décrivant le problème sont :

$$\frac{dN_A}{dt} = -\frac{Q}{\Delta H_{vap}} \quad \text{avec} \quad \Delta H_{vap} = 52.053(1 - T/647.13)^{0.321} \quad \text{et} \quad T=T(x_A)$$

$$\frac{dx_A}{dt} = \frac{Q}{N_A \Delta H_{vap}} (x_A - y_A) \quad \text{avec} \quad y_A = f(x_A) \quad (\text{Equilibre L-V})$$

$$\text{avec} \quad x_B = \frac{x_A(t=0)N_A(t=0) - x_A N_A}{N_B}, \quad N_B = N_A(t=0) - N_A$$

Voir l'algorithme ci-dessous

Utiliser la fonction Matlab **ode45** basée sur la méthode de Runge-Kutta pour résoudre ce problème.

Ecriture du programme principal :

Appeler la fonction $[t, z] = \text{ode45}(@\text{odefun}, \text{trange}, z0)$

Avec $\text{trange} = [0 \ 2000]$, $z0(1)=100$, $z0(2)=0.05$.

Calculer $NB(t) = NA0 - NA$

$x_B = (NA0 \ x_{A0} - NA \ x_A) / NB$

Tracer l'évolution de NB, de T, et de x_B en fonction du temps.

Ecriture de la fonction $f = \text{odefun}(t,z)$

Initialiser P, la matrice g

Calculer l'équilibre liquide vapeur : initialiser les $x_A(1) = z(2)$ et $x_A(2)=1-x_A(1)$

Calculer la composition $y_A = f(x_A)$ et la température T_A en appelant la fonction $[y_A, T] = \text{tsatur}(x, g, P)$

Calculer $\Delta H_{vap}(T_A)$, puis écrire le système d'équations diff. : $f(1) = \dots f(2) =$ selon les équations du problèmes.

Déroulement du projet :

Séance 1 : présentation détaillée du projet et commencement de l'écriture du programme (écriture des fonctions $\text{psat}(t)$ et NRTL).

Séance 2 : résoudre le problème de l'équilibre liquide vapeur : fonction $\text{tsatur}(x, g, P)$ + plus commencement de l'optimisation.

Séance 3 : optimisation des données expérimentales avec $\text{fminsearch}(@\text{fobj}, \dots)$ fin de la partie I du projet. Commencement de la fonction coût.

Séance 4: partie II : $\text{cout}(R)$

Séance 5 : fin de l'écriture de la fonction coût, minimisation de $\text{cout}(R)$ et mise en place des sorties graphiques. Début de la partie III.

Séance 6 : Réalisation de la partie III. Début de la préparation des transparents.

Séance 7 : présentations orales des projets